

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

**ÁREA DE CONCENTRAÇÃO
SISTEMAS DE PROCESSOS QUÍMICOS E INFORMÁTICA**

**MODELAGEM SIMULAÇÃO E CONTROLE DE UM REATOR RADIAL
EMPREGADO NA ISOMERIZAÇÃO DE XILENOS**

Autora: Vanja Célia Sales Ribeiro

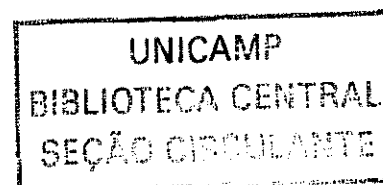
Orientador: Prof. Dr. João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira

Co-Orientadora: Profa. Dra. Maria de Fátima dos Santos Lopes

Tese de Doutorado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

**Campinas – São Paulo
Junho de 2002**

**UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL**



UNIDADE 08
Nº CHAMADA T/UNICAMP
R354m
V _____ EX _____
TOMBO BCI 51026
PROC 16-837102
C _____ D^x _____
PREÇO R\$ 11,00
DATA 27/09/02
Nº CPD _____

ii

CM001742B9-0

BIB ID 259209

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

R354m Ribeiro, Vanja Célia Sales
Modelagem simulação e controle de um reator radial
empregado na isomerização de xilenos / Vanja Célia Sales
Ribeiro. --Campinas, SP: [s.n.], 2002.

Orientador: João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira e
Maria de Fátima dos Santos Lopes.

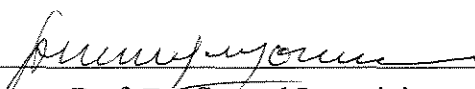
Tese (doutorado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Isomerização. 2. Controle preditivo. I. Pereira, João
Alexandre Ferreira da Rocha. II. Lopes, Maria de Fátima
dos Santos. III. Universidade Estadual de Campinas.
Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

Tese de Doutorado defendida por Vanja Célia Sales Ribeiro e aprovada em 31 de julhoⁱⁱⁱ
de 2002 pela banca examinadora constituída pelos doutores:




Prof. Dr. João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira – Orientador



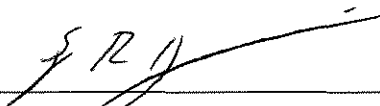
Prof. Dr. Samuel Luporini



Prof. Dr. Alexandre Nunes Ponezi



Profa. Dra. Ana Maria Frattini Fileti



Prof. Dr. Sérgio Pérsio Ravagnani

20245693

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Doutorado em Engenharia Química.

v

A handwritten signature in black ink, consisting of a stylized 'J' followed by a series of loops and a horizontal line.

Prof. Dr. João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira

Aos meus pais, meu marido e
meus filhos.

Ao Prof. Dr. João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira, pela orientação e confiança, durante o desenvolvimento deste trabalho.

A Profa. Dra. Maria de Fátima dos Santos Lopes, pela orientação e disponibilidade.

Ao Prof. Dr. Samuel Luporini pelo auxílio e disponibilidade.

Aos meus irmãos e amigos pelo incentivo e colaboração.

Ao meu marido e meus filhos pela abdicação, paciência e incentivo.

A CAPES pelo auxílio financeiro prestado.

A todos que contribuíram de alguma maneira para a realização deste trabalho.

RESUMO

O grande interesse comercial pelo processo de isomerização de xilenos é devido à utilização do para-xileno na obtenção de produtos que lhe conferem elevado valor agregado.

O reator industrial típico usado nesse processo é adiabático de leito fixo com escoamento radial e fluxo centrípeto. Durante a operação ocorre a redução da atividade do catalisador, provocada por formação e depósito de compostos de carbono, levando a conversão a níveis antieconômicos.

A temperatura do reator é mantida através do aquecimento da corrente de alimentação num forno industrial do tipo caixa com tubos.

Os objetivos deste estudo são a elaboração de modelos para o processo catalítico submetido a desativação do catalisador e para o forno de aquecimento da mistura reagente, e a implementação de uma estratégia de controle avançado para a automatização da planta.

O modelo dinâmico desenvolvido para o reator considera a desativação do catalisador. O forno foi representado por um modelo simplificado onde o tempo é a variável independente.

Os resultados obtidos na simulação do sistema evidenciam a validade dos modelos utilizados que permitem a avaliação preliminar qualitativa do comportamento do processo.

A característica não estacionária do processo, com grande interação entre as variáveis operacionais, requer o desenvolvimento de sistemas de controle de elevado desempenho, obtidos através da utilização de técnicas digitais avançadas.

Foi sugerida uma estratégia de controle em cascata onde a malha primária controla a concentração de para-xileno na saída do reator através da manipulação da temperatura de entrada deste e a malha secundária controla a temperatura de saída do forno, em função dos dados obtidos no reator, através da manipulação da vazão de combustível. Foram utilizadas as técnicas de controle preditivo com modelo interno IMC e do PID convencional.

Os resultados obtidos mostram que a estratégia de controle proposta é eficiente para o controle da concentração de para-xileno na saída do reator. O controlador IMC preditivo apresentou melhores resultados sendo o mais indicado entre os tipos estudados.

ABSTRACT

The great commercial interest in xylenes isomerization process is due to the high aggregated value conferred to p-xylene in many industrial applications.

Typical industrial adiabatic fixed-bed reactor with radial centripet flow is used in this process. During operation catalyst activity decay occurs due carbon compounds formation and deposition, reducing reaction conversion to not-economical levels.

Reactor temperature is obtained by the feed flow heating inside an industrial box and tube furnace.

The reactor dynamic model developed considers catalyst deactivation. The furnace was represented by a simplified model where time is the independent variable.

The objective of this study is the development of process models for the catalytic reaction with decaying activity system and for the feed flow heating furnace system, and the implementation of an advanced control strategy for plant automatization.

System Simulation results show the used models validity. They avoid qualitative preliminar evaluation of process behaviour.

The process non-stationary characteristic, combined with the great operational variables interaction, apply for development of high performance control systems, which use advanced digital design techniques.

A cascade control strategy was proposed, where primary control loop has p-xylene concentration as controlled variable and manipulates the reactor input temperature, and the secondary control loop uses the fuel flow as manipulated variable to control the output furnace temperature. The predictive internal model control and PID conventional feedback control techniques were used.

The results show the efficiency of the proposed strategy in controlling reactor outlet p-xylene concentration. The predictive IMC controller shows the best results being indicated as the best controller for that purpose.

RESUMO	xi
ABSTRACT	xiii
NOMENCLATURA	xvii
INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 1. REVISÃO DA LITERATURA	5
1.1. Introdução	7
1.2. Análise da literatura	7
1.2.1. Processo	8
1.2.2. Controlador convencional	10
1.2.3. Controlador com modelo interno	14
1.2.3.1. Estrutura básica do IMC	15
1.2.3.2. IMC com Preditor Analítico Generalizado	18
1.2.4. Controlador preditivo com modelo	21
1.2.5. Controlador preditivo com modelo interno	24
1.3. Comentários	30
CAPÍTULO 2. MODELOS PARA O PROCESSO	31
2.1. Introdução	33
2.2. Sistema de reações estudado	33
2.2.1. Processo industrial	35
2.2.2. Cinética da reação	36
2.2.3. Cinética da desativação do catalisador	39
2.3. Modelo do reator	42
2.3.1. Balanço de massa no leito catalítico	43
2.3.2. Balanço de energia no leito catalítico	45
2.3.3. Adimensionalização	46
2.4. Algoritmos dos programas	50
2.5. Métodos Numéricos	51
2.5.1. Parâmetros do método numérico	54
2.6. Modelo do forno	55
2.6.1. Balanço de massa no sistema de combustão	56

2.6.2. Balanço de massa no fluido de processo	57
2.6.3. Balanço de energia no sistema de combustão	57
2.6.4. Balanço de energia no fluido de processo	58
2.7. Comentários	59
CAPÍTULO 3. RESULTADOS DA SIMULAÇÃO	61
3.1. Introdução	63
3.2. Resultados da simulação do reator	63
3.3. Resultados da simulação do forno	73
3.4. Comentários	76
CAPÍTULO 4. RESULTADOS DA IMPLEMENTAÇÃO DA ESTRATÉGIA DE CONTROLE	79
4.1. Introdução	81
4.2. Resultados obtidos com a estrutura básica do controlador IMC	82
4.3. Resultados obtidos com o controlador IMC com Preditor Analítico Generalizado	86
4.4. Resultados obtidos com o controlador IMC preditivo	90
4.5. Resultados obtidos com o PID digital	103
4.6. Resultados obtidos no controle do forno	108
4.7. Comentários	110
CAPÍTULO 5. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	111
5.1. Conclusões	113
5.2. Sugestões	115
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	117
ANEXO 1. LISTAGEM DOS PROGRAMAS PARA SIMULAÇÃO	123
ANEXO 2. DADOS PARA SIMULAÇÃO	137
ANEXO 3. MODELO DE CONVOLUÇÃO	145
ANEXO 4. SUBROTINAS DE CÁLCULO DOS CONTROLADORES	151

NOMENCLATURA

LETRAS LATINAS

- a_i - coeficiente da resposta ao degrau
 b^T - vetor linha do método IMC
 B_n - matriz diagonal $\{\beta_i\}$
 C - variável controlada
 C_i - concentração molar do componente i (mol/cm³)
 C_p - calor específico do fluido (adimensional)
 c_p - calor específico do fluido à pressão constante (cal/mol K)
 D - algoritmo do controlador por retroalimentação
 D_i - coeficiente de difusão da lei de Fick (cm²/s)
 d - variável distúrbio
 G - função de transferência do processo
 G_o - velocidade mássica (g/cm² s)
 H - função de transferência do modelo sem atraso de transporte
 h_i - coeficiente da resposta ao impulso
 h - intervalo de integração do método numérico (adimensional)
 k - instante de tempo atual
 K_c - ganho do controlador
 K_n - constante da equação da taxa da reação n na rede
 K_i - constante de adsorção do componente i
 K_p - ganho do processo
 $K_{v,ef}$ - condutividade térmica efetiva na direção radial (cal/cm . °C . s)
 $K_{z,ef}$ - condutividade térmica efetiva na direção axial (cal/cm . °C . s)
 M,m - variável manipulada
 N - horizonte do modelo do processo
 P - horizonte de predição

P_i	- pressão parcial do componente i (atm)
PM	- peso molécula médio da mistura (g/mol)
P_T	- pressão total (atm)
R	- ponto de referência ('Set point')
R, r	- raio (cm)
ri	- taxa de reação do componente i (mol/s)
R_{Gi}	- velocidade global da reação por unidade de volume do fluido reagente (moles de A formados/cm ³ . s)
t	- tempo de operação
T	- temperatura absoluta (K)
T_M	- temperatura máxima (K)
v	- velocidade (cm/s)
V	- volume (cm ³)
y	- saída do processo
Z	- variável da transformada Z

LETRAS GREGAS

Λ	- matriz dos coeficientes da resposta ao impulso
α	- parâmetro de desativação
α_f	- constante do filtro
β	- constante do filtro da carga
β_i	- pesos aplicados à variável manipulada no horizonte de predição
γ_i	- pesos aplicados à variável controlada no horizonte de predição
τ_I	- tempo integral
τ_D	- tempo derivativo
ε	- porosidade do leito catalítico (adimensional)
ΔH	- entalpia da reação (cal/g . mol)
μ	- fator de efetividade (adimensional)
ρ	- massa específica do fluido (g/cm ³)

SUBSCRITOS

<i>B</i>	- referente ao leito catalítico
<i>ef</i>	- efetivo
<i>i</i>	- espécie química
<i>j</i>	- intervalo de amostragem na predição
<i>M</i>	- máximo
<i>O</i>	- nas condições iniciais
<i>OX</i>	- orto-xileno
<i>P</i>	- à pressão constante
<i>q</i>	- refere-se às etapas na rede de reações
<i>T</i>	- total

INTRODUÇÃO

A isomerização de xilenos é um processo de grande importância comercial fazendo parte de uma seqüência de etapas destinadas à obtenção de vários produtos aromáticos. Através desse processo procura-se maximizar a produção de para-xileno, utilizado na obtenção do ácido tereftálico (matéria prima para a produção de fibras poliésteres, filmes, resinas, plastificastes) e produção de tintas entre outros produtos que lhe conferem um grande valor agregado.

A mistura reagente que alimenta o reator de isomerização de xilenos é uma corrente secundária da unidade de recuperação de para-xileno e tem uma parte comercializada como solvente. A principal função do processo é restabelecer a concentração de equilíbrio de uma mistura de aromáticos C_8 a partir de uma mistura contendo 1% de para-xileno, 15% de orto-xileno e 57% de meta-xileno. Nessa condição é obtida a recuperação máxima de para e orto-xileno. O hidrogênio utilizado para promover a isomerização e reduzir a formação de coque, responsável pela desativação do catalisador, é adicionado à corrente que alimenta o reator. A pressão e a temperatura são variáveis importantes, que influenciam a velocidade da reação, a seletividade e a atividade do catalisador, com consequente alteração na conversão dos reagentes.

A manutenção do estado de equilíbrio termodinâmico entre os três isômeros é determinante para o bom desempenho do processo. Porém esse estado é continuamente alterado pelo caráter dinâmico do sistema. As variáveis do processo sofrem constantes modificações ao longo do tempo de operação, provocadas por alterações nas condições de entrada como a temperatura, a vazão total de hidrocarbonetos, a vazão de hidrogênio e redução da atividade do catalisador.

A principal variável desse processo é a temperatura. Para uma determinada vazão de alimentação uma elevação na temperatura do reator provoca o aumento da intensidade da reação promovendo o crescimento da tendência ao equilíbrio dos xilenos. Porém aumenta também a perda de anéis aromáticos C_8 . Para compensar essa perda é necessário elevar a pressão parcial do hidrogênio para manter a conversão de etilbenzeno a xilenos por meio da ponte naftênica, e para prevenir o aumento da formação de coque na superfície do catalisador. A pressão parcial de hidrogênio é determinada pela relação

hidrogênio/hidrocarbonetos que é um parâmetro importante para a reação de isomerização de xilenos.

O reator industrial típico usado nesse processo é adiabático de leito fixo com escoamento radial e fluxo centrípeto.

A temperatura do reator de isomerização de xilenos é mantida através do aquecimento da corrente de alimentação em um forno industrial, do tipo caixa com tubos dispostos em forma de serpentina, através da queima de um combustível.

A importância do controle em processos químicos está evidenciada na operação segura e eficiente das plantas industriais que necessitam ao mesmo tempo manter a especificação de qualidade dos produtos com menor custo e obedecer as leis de proteção ambiental. O uso de microcomputadores de alta velocidade e exatidão e com grande capacidade de memória juntamente com a instrumentação digital tem proporcionado o desenvolvimento de sistemas de controle de alto desempenho necessários a operação da maioria dos processos modernos principalmente em plantas integradas.

Os sistemas de controle são usados para manter o processo o mais próximo possível do valor desejado de uma determinada condição operacional. O benefício dessa ação muitas vezes justifica o uso de técnicas digitais sofisticadas que vão além dos controladores convencionais encontrados normalmente nas plantas industriais. Entre as aplicações de sucesso se encontra a aproximação baseada no modelo do processo para análise e projeto de controladores.

Com base nessas informações propõe-se a elaboração de modelos para o processo catalítico, onde se considera a desativação do catalisador, e para o forno de aquecimento da mistura reagente, visando a implementação de um sistema de controle avançado para a automatização da operação da planta.

O sistema de controle deve manter o equilíbrio termodinâmico da mistura de xilenos na saída do reator, alterado em função da dinâmica do processo. A concentração dos produtos é reduzida com o tempo de operação devida à desativação do catalisador. Para este estudo dispõe-se de um modelo paramétrico do processo catalítico sem desativação do catalisador e, dados de literatura e de uma indústria do Polo Petroquímico de Camaçari.

O sistema de controle deve funcionar em cascata sendo que, a malha primária controla a concentração de para-xileno na saída através da manipulação da temperatura de

entrada do reator (problema regulador), e a malha secundária utiliza a temperatura de entrada no reator como trajetória de referência (SP) para controlar a temperatura de saída do forno, através da manipulação da vazão de combustível (problema servo).

Controle em cascata é uma estratégia de controle avançado utilizada quando a variável manipulada está sujeita a distúrbios que podem provocar perturbações na variável controlada. No processo de isomerização de xilenos variações na vazão de combustível provocam alterações no valor da temperatura da corrente de reagentes na saída do forno e que é alimentada ao reator. A temperatura dessa corrente é a variável manipulada proposta para o controle do reator. Distúrbios nessa variável irão como consequência provocar alterações na variável controlada.

Nas ultimas décadas houve um grande interesse por parte das indústrias e dos pesquisadores na utilização de modelos do processo para desenvolver novos tipos de controladores. Muitos trabalhos foram publicados com aplicações do controle preditivo com modelo (MPC) em processos multivariável com muitas restrições e processando grandes quantidades de material (Luyben e Luyben, 1997). Segundo Zhan e Ishida (1997) as principais razões dessa popularidade são a maneira intuitiva e explícita de elaboração do projeto e introdução das restrições.

A técnica de controle preditivo com modelo utiliza um modelo do processo para prever as saídas futuras num determinado período de tempo. O projeto do controlador é baseado no comportamento do processo predito num determinado horizonte de tempo.

A estratégia de projeto de sistemas de controle conhecida como controle com modelo interno (IMC) (Garcia e Morari, 1982) foi escolhida para implementação neste estudo pois relaciona os ajustes do controlador com os parâmetros do modelo do processo de uma forma mais direta, além de oferecer a vantagem de levar em consideração as incertezas do modelo de forma explícita. O que distingue o controlador IMC é a maneira direta como estão relacionados o bom desempenho com a estabilidade e a robustez do sistema, o que o torna atrativo para aplicações industriais. O controlador foi aplicado ao sistema linear com única entrada e única saída (SISO).

Subawala e colaboradores (1996) efetuaram uma comparação entre os controladores baseados em modelo do processo incluindo o IMC, e o convencional em

experimentos com quatros sistemas não lineares. Estes pesquisadores comprovaram a eficiência do IMC além de ser o algoritmo mais fácil de implementar.

Foi também implementado ao sistema o controlador PID digital para comparação dos resultados.

Este estudo está dividido em cinco capítulos. No primeiro capítulo é apresentada uma revisão da literatura estudada contendo a descrição dos algoritmos utilizados no desenvolvimento da estratégia de controle implementada. No segundo capítulo são mostradas as equações utilizadas na elaboração dos modelos dos processos e as simplificações adotadas. O terceiro capítulo traz os resultados da simulação do reator de isomerização de xilenos e do forno de aquecimento da mistura reagente. No quarto capítulo são mostrados os resultados obtidos com a implementação da estratégia de controle proposta. O quinto capítulo apresenta as conclusões finais e algumas sugestões para estudos futuros.

CAPÍTULO 1

REVISÃO DA LITERATURA

1.1. INTRODUÇÃO

O processo de isomerização de xilenos desperta interesse comercial em função da utilização do para-xileno em aplicações de elevado valor agregado. A modelagem e simulação desse reator foi elaborada considerando a função principal de recuperação da quantidade máxima possível de para-xileno de uma corrente de resíduo da unidade de recuperação de para-xileno contendo cerca de 1% desse produto. Na reação de isomerização esse teor é elevado porém, a mistura é diluída com hidrogênio por exigência da cinética da reação e para controlar a desativação do catalisador, obtendo-se na saída do reator cerca de 2,5 mol % de para-xileno.

Devido ao baixo valor da variável que se deseja controlar, e da natureza não estacionária entre outros problemas encontrados nos processos químicos, deseja-se utilizar uma técnica de controle baseada em um modelo do processo mais apropriado à não idealidade do sistema, que permita incluir as restrições das variáveis de forma adequada. Para isso foi feita uma análise da literatura voltada para a utilização de um controlador preditivo com modelo.

1.2. ANÁLISE DA LITERATURA

As maiores dificuldades encontradas nos processo químico, segundo Chen e Sun (1991) são: a natureza não linear e não estacionária do processo; a dificuldade de medição da variável a ser controlada; o atraso de transporte do processo e das medições, e o aspecto multivariável da maioria dos processo industriais.

Os objetivos principais deste estudo são a elaboração de modelos adequados para o processo, e o desenvolvimento de um sistema de controle digital para a operação automática de um sistema de reação catalítica capaz de superar as dificuldades próprias do processo onde ocorre desativação do catalisador.

O sistema de reação em estudo é formado por um reator catalítico adiabático de leito fixo com escoamento radial e fluxo centrípeto utilizado para a reação de isomerização

de xilenos e um forno do tipo caixa com tubos dispostos em forma de serpentina necessário para o aquecimento da mistura reagente.

A seguir será apresentada a análise da literatura estudada.

1.2.1. PROCESSO

O modelo dinâmico do reator foi desenvolvido por Pires (1997) baseado no modelo para simulação em estado estacionário elaborado por Bhatia e colaboradores (1989), que adota o mecanismo de reação proposto por Cortes e Corman (1980).

A desativação do catalisador provoca alterações nas características do processo com o tempo. Neste estudo, na busca de uma descrição mais apropriada foi introduzido no modelo do reator um conjunto de equações que descreve a cinética do processo de desativação do catalisador por depósitos de carbono.

As causas e implicações da desativação do catalisador na indústria tem sido analisadas e foram propostos alguns mecanismos para a descrição desse fenômeno.

Froment e Bischoff (1962) estudaram a cinética de processos realizados em reator de leito fixo com desativação do catalisador por depósitos de carbono, e usaram como exemplo uma equação simplificada de forma exponencial para representar a função de atividade do catalisador, obtendo resultados coerentes.

De Pauw e Froment (1975) caracterizaram a desativação de um catalisador de platina por depósitos de coque num reator de isomerização de n-pentano usando várias relações entre o hidrogênio e o pentano. Observaram a ocorrência de desativação do catalisador para baixas relações desses componentes e que a deposição de carbono no leito catalítico obedece a um perfil. Notaram também que a dependência do coeficiente da taxa de formação de coque com a temperatura obedece a lei de Arrhenius a exemplo dos outros componentes da mistura reagente. Foram testadas várias funções para determinar a relação entre a desativação do catalisador e o teor de coque. A que melhor se ajustou aos dados experimentais foi a função exponencial simplificada, testada anteriormente por Froment e Bischoff (1962).

Mais tarde Dumez e Froment (1976) estudaram várias relações, para a representação da formação do coque, tanto empíricas quanto baseadas no conceito de Hougen-Watson e utilizaram também diversas expressões para a desativação do catalisador. A taxa de formação de coque foi considerada diretamente proporcional à pressão parcial dos componentes da mistura reagente. O uso da equação exponencial empírica simplificada combinada com essa equação da taxa, apresentou resultados excelentes na predição do desempenho de um reator integral experimental, e de um reator industrial de desidrogenação de buteno-1 a butadieno, onde ocorre desativação do catalisador por deposição de coque. Também foi observada a influência da concentração de hidrogênio na formação desses compostos de carbono.

Vários outros autores estudaram a equação cinética mais apropriada para a deposição de coque em catalisadores. Corella e Asúa (1982) propuseram um modelo aproximado de variáveis não separáveis que se aplica ao projeto de reatores, mas não é adequada para a determinação do mecanismo de desativação, uma vez que pode ocorrer mais de um mecanismo ao mesmo tempo. A desativação também pode ocorrer por duas ou mais causas simultâneas e diferentes, o que foi estudado por Corella e Monzon (1998). Esses autores propuseram um modelo de variáveis não separáveis que contempla a interação entre as ações de duas causas diferentes de desativação, que se mostrou bem ajustado aos resultados experimentais.

Recentemente Henriques e colaboradores (1997) utilizaram um sistema de isomerização de orto-xileno sobre zeólita para caracterizar a formação de coque, que é a causa principal da desativação do catalisador. A composição do coque sofre influência da temperatura de reação e é importante para a descrição do modelo da desativação. Pesquisa semelhante foi realizada por Marin e colaboradores (1998) utilizando a isomerização de meta-xileno sobre zeólita. A desativação rápida observada foi causada por formação e deposição de coque no catalisador. Também houve alteração na reação aumentando a incidência do desproporcionamento em relação a isomerização, e um decréscimo significativo na seletividade do para-xileno em relação ao orto-xileno.

1.2.2 CONTROLADOR CONVENCIONAL

Muitas aplicações na indústria são atendidas com os algoritmos convencionais de controle por retroalimentação. Algumas dificuldades encontradas nos processos químicos são superadas com o uso desses controladores na sua forma digital e, acrescentando elementos que antecipam (feedforward) as mudanças na variável de saída e fazem a correção apropriada na variável manipulada, ou utilizando a estratégia de controle inferencial adaptativo.

A estratégia de controle inferencial foi proposta por Joseph e Brosilow (1978) e o controle adaptativo foi testado em processos químicos por Åström e colaboradores (1977) conforme citado por Chen e Sun (1991).

Com a disponibilidade de computadores digitais para aplicações em controle de processos aumentaram as possibilidades de elaboração de projetos mais exigentes que procuram satisfazer as propriedades teóricas desejadas nos algoritmos de controle digital dentre as quais pode-se ressaltar:

- Comportamento regulador. A variável de saída deve ser mantida no seu valor de referência independente do distúrbio que afeta o sistema.
- Comportamento servo. Variações no valor de referência devem ser seguidas de forma rápida e suave.
- Robustez. A estabilidade e o bom desempenho do controlador devem ser mantidos mesmo quando há variações no processo.
- Possibilidade de considerar as restrições, na entrada e de estado, do processo de forma mais direta no projeto do controlador.

Esses algoritmos são projetados através do método da transformada Z e, permitem especificar as características da resposta desejada baseada na função de transferência do processo. No caso do controlador convencional é possível obter o equivalente digital onde as constantes do controlador são ajustadas de forma a se obter a resposta desejada.

Um dos tipos de controladores comerciais mais importantes é o controlador Proporcional-Integral-Derivativo (PID). Esse controlador é largamente usado em processos

industriais com troca térmica. É um controlador por retroalimentação (feedback) que combina os três modos básicos de ação de controle com o objetivo de reduzir o erro entre o valor especificado (set point) e o valor medido da variável controlada (Seborg, 1988).

A equação do controlador PID ideal contínuo é obtida somando as equações dos três modos básicos:

$$p(t) = \bar{p} + K_c \left[e(t) + \frac{1}{\tau_I} \int_0^t e(t) dt + \tau_D \frac{de(t)}{dt} \right] \quad (1)$$

onde,

p = sinal de saída do controlador

e = sinal de erro do controlador

K_C = ganho do controlador

τ_I = constante de tempo integral

τ_D = constante de tempo derivativa

O controle do processos por computador requer a descrição do equivalente digital do controlador convencional descrito acima, que é uma equação discreta no tempo.

Para obter a forma digital da equação 1 são usadas as aproximações por diferenças finitas seguintes:

$$\int_0^t e(t) dt \approx \sum_{K=1}^n e_K \Delta t \quad \text{e} \quad \frac{de}{dt} \approx \frac{e_n - e_{n-1}}{\Delta t} \quad (2)$$

A forma digital do controlador PID pode ser escrita de duas maneiras, a forma posição e a forma velocidade. A forma posição é obtida substituindo a equação 2 na equação 1:

$$p_n = p + K_c \left[e_n + \frac{\Delta t}{\tau_I} \sum_{K=1}^n e_K + \frac{\tau_D}{\Delta t} (e_n - e_{n-1}) \right] \quad (3)$$

A forma velocidade do controlador PID digital é obtida a partir da variação na saída do controlador Δp_n que é dada por:

$$\Delta p_n = p_n - p_{n-1} = p'_n - p'_{n-1} \quad (4)$$

Essa forma tem algumas vantagens em relação à forma posição do controlador PID, pois evita o somatório dos erros, não requer a especificação do valor nominal de referência em estado estacionário (\bar{p}) e é menos propenso a problemas de saturação integral ('reset windup').

Escrevendo a forma posição para p_{n-1} e substituindo na equação 3, encontra-se a forma velocidade:

$$\Delta p_n = K_C \left[(e_n - e_{n-1}) + \frac{\Delta t}{\tau_I} e_n + \frac{\tau_D}{\Delta t} (e_n - 2e_{n-1} + e_{n-2}) \right] \quad (5)$$

Outra variação para o controlador PID digital é obtida utilizando a aproximação trapezoidal para o termo integral:

$$\int_0^t e(t') dt' \approx \sum_{K=1}^n \left(\frac{e_K + e_{K-1}}{2} \right) \Delta t \quad (6)$$

Substituindo na equação 1, a forma velocidade fica:

$$\Delta p_n = K_C \left[(e_n - e_{n-1}) + \frac{\Delta t}{\tau_I} \left(\frac{e_n + e_{n-1}}{2} \right) + \frac{\tau_D}{\Delta t} (e_n - 2e_{n-1} + e_{n-2}) \right] \quad (7)$$

A diferença no resultado obtido com essa equação e o algoritmo de velocidade da equação 5 não é muito significativa obtendo-se pequena diferença também nos valores de K_C , τ_I e τ_D que são os parâmetros de ajuste do controlador (Seborg, 1989). Num controlador PID digital essas constantes são ajustadas de forma a se obter a resposta desejada. Existem algumas maneiras de se estimar esses ajustes, dentre elas pode-se destacar as relações de projeto propostas por Cohen-Coon, o critério da integral do erro e a técnica de controle com modelo interno (IMC).

Para um sistema representado por uma função de transferência de primeira ordem com atraso de transporte, Cohen e Coon propuseram as seguintes relações de projeto dos controladores.

Controlador PID:

$$K_c = \frac{1}{K_P} \frac{\tau_P}{\theta_D} \left[\frac{16\tau_P + 3\theta_D}{12\tau_P} \right] \quad \tau_I = \frac{\theta_D \left[32 + 6 \left(\frac{\theta_D}{\tau_P} \right) \right]}{13 + 8 \left(\frac{\theta_D}{\tau_P} \right)} \quad \tau_D = \frac{4\theta_D}{11 + 2 \left(\frac{\theta_D}{\tau_P} \right)} \quad (8)$$

K_P , τ_P e θ_D são respectivamente o ganho, a constante de tempo e o atraso de transporte do processo.

O critério da integral do erro apresenta três índices de desempenho diferentes, cuja escolha depende do tipo de resposta desejada. O programa com o algoritmo de controle PID deve ser simulado e as constantes do controlador ajustadas de forma a minimizar o valor da integral do erro.

1. Integral do valor absoluto do erro

$$IAE = \int_0^{\infty} |e| dt \quad (9)$$

2. Integral do quadrado do erro

$$ISE = \int_0^{\infty} [e]^2 dt \quad (10)$$

3. Integral do produto do tempo pelo valor absoluto do erro

$$ITAE = \int_0^{\infty} t|e| dt \quad (11)$$

Na maioria dos casos o critério ITAE é preferido porque os valores obtidos são mais conservadores. Seborg e colaboradores (1989) apresentam as relações de projeto de controladores que minimizam o índice de desempenho ITAE para um controlador PID ideal com variação em degrau na carga e no valor de referência ('set point').

O critério de ajuste dos parâmetros pelo método IMC, para função de transferência de primeira ordem com atraso de transporte, é representado pelas equações a seguir:

$$k_c = \frac{1}{k_P} \cdot \frac{2 \left(\frac{\tau_c}{\theta_D} \right) + 1}{2 \left(\frac{\tau_c}{\theta_D} + 1 \right)}; \quad \tau_I = \frac{\theta_D}{2} + \tau_P \quad \text{e} \quad \tau_D = \frac{\tau_P}{2 \left(\frac{\tau_P}{\theta_D} \right) + 1} \quad (12)$$

com $\tau_c / \theta_D > 0.8; \tau_c > \tau_p / 10$

onde τ_c = constante de tempo da função de transferência em malha fechada desejada.

Nessas equações foi utilizado um filtro exponencial de primeira ordem. Horn e colaboradores (1996) estudaram outras expressões para o filtro do IMC resultando em equações mais apropriadas para o caso específico onde a dinâmica do processo em malha aberta é mais lenta do que em malha fechada.

Esses métodos de ajuste funcionam bem para a maioria dos processos porém, existem estudos específicos desenvolvidos para os casos onde essas equações não se aplicam. Um exemplo é o estudo de Luyben (1996) que apresenta um método especial para ajuste dos parâmetros do PID aplicado a processos com grandes constantes de tempo, modelados por uma função de transferência composta somente do ganho e do atraso de transporte.

1.2.3 CONTROLADOR COM MODELO INTERNO

Entre os algoritmos que são projetados através da transformada Z está o do controle com modelo interno (IMC), que pode ser desenvolvido a partir do Preditor de Smith adotado por Brosilow (1979), do diagrama de blocos para sistema SISO com dados amostrados usado por Garcia e Morari (1982), ou do método de síntese direta usado por Chawla (1979), todos citados por Deshpande (1998).

O IMC é uma estratégia de projeto importante porque relaciona os ajustes do controlador com os parâmetros do modelo do processo de uma forma direta. Além disso tem a vantagem de considerar as incertezas do modelo e permite a inclusão da robustez como objetivo do projeto de forma explícita (Deshpande e Ash, 1988). Também o controlador resultante é mais fácil de ser projetado do que os obtidos com os outros algoritmos.

1.2.3.1. ESTRUTURA BÁSICA DO IMC

O algoritmo do IMC pode ser obtido através do diagrama de blocos típico de um sistema de controle SISO com dados amostrados, conforme apresentado na figura 1.

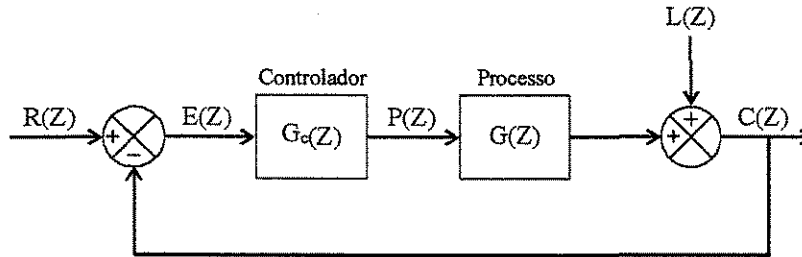


Figura 1. Controle clássico por retroalimentação.

No diagrama de blocos $G(Z)$ é a função de transferência do processo que inclui os elementos necessários para o controle no sistema amostrado, e $G_c(Z)$ é o algoritmo de controle que pode ser do tipo PID ou outro baseado na transformada Z .

Usando o modelo do processo e adicionando o efeito da entrada $P(Z)$ ao mesmo pode-se obter um novo sistema equivalente ao anterior que após simplificação resulta no diagrama de blocos da figura 2 que representa a estrutura básica do IMC.

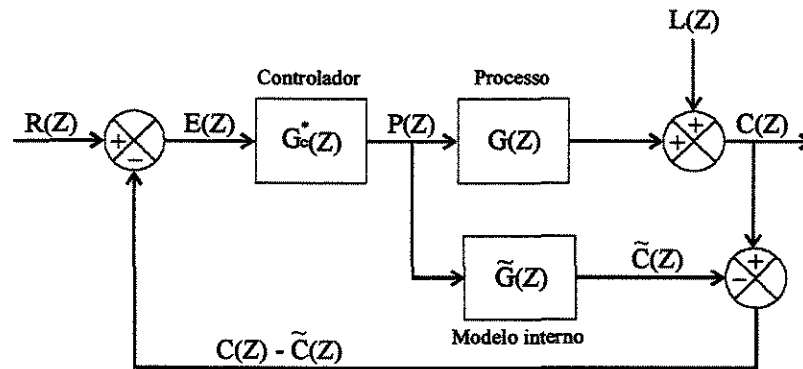


Figura 2. Controle com modelo interno.

As funções de transferência a seguir são obtidas da figura 2:

$$P(Z) = \frac{G_c^*(Z)}{1 + G_c^*(Z)[G(Z) - \tilde{G}(Z)]} [R(Z) - L(Z)] \quad (13)$$

$$C(Z) = L(Z) + \frac{G_c^*(Z)G(Z)}{1 + G_c^*(Z)[G(Z) - \tilde{G}(Z)]} [R(Z) - L(Z)] \quad (14)$$

A condição necessária e suficiente para a estabilidade do sistema é que as raízes das equações características das funções acima, caiam dentro do círculo unitário no plano Z . Na ausência de erros do modelo do processo essas equações se reduzem a:

$$\frac{1}{G_c^*(Z)} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{1}{G_c^*(Z)G(Z)} = 0 \quad (15)$$

A equação 14 mostra que o controle perfeito pode ser obtido fazendo-se:

$$G_c^*(Z) = \frac{1}{\tilde{G}(Z)} \quad (16)$$

Ou seja o algoritmo de controle com modelo interno pode ser definido como sendo o inverso da função de transferência do processo.

Porém a função $\tilde{G}(Z)$ pode conter atraso de transporte e zeros fora do círculo unitário o que resultaria num controlador instável e/ou fisicamente não realizável. Essa função pode então ser fatorada em duas partes conforme a equação a seguir:

$$\tilde{G}(Z) = \tilde{G}_+(Z)\tilde{G}_-(Z) \quad (17)$$

$\tilde{G}_+(Z)$ contém o atraso de transporte e os zeros da metade direita do plano e $\tilde{G}_-(Z)$ contém os termos remanescentes da função de transferência do processo.

Após a fatoração o controlador IMC perfeito é obtido usando a seguinte equação:

$$G_c(Z) = \frac{1}{\tilde{G}_-(Z)} \quad (18)$$

Para melhorar a robustez do controlador na presença de erros de modelagem e garantir que o mesmo seja fisicamente realizável é necessário inserir um filtro na linha do sinal de retroalimentação conforme figura 3.

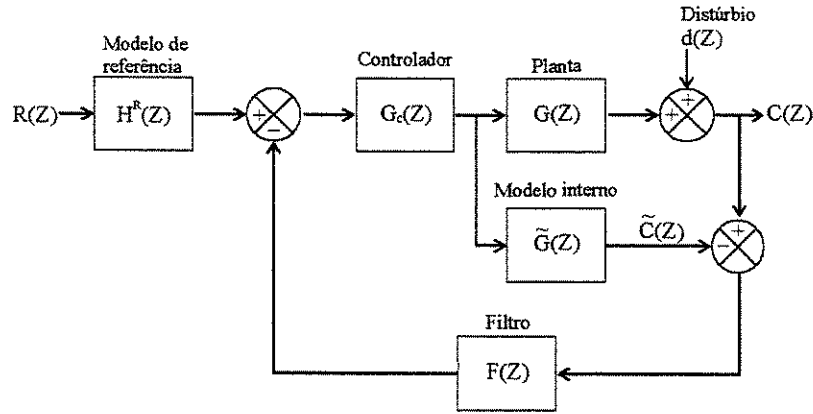


Figura 3. Estrutura completa do controlador IMC.

A equação do controlador IMC com o filtro fica:

$$G_c(Z) = \frac{1}{\tilde{G}_-(Z)} f(Z) \quad (19)$$

O filtro é selecionado de forma que as raízes da equação característica fiquem dentro do círculo unitário no plano Z . Garcia e Morari utilizaram um filtro de primeira ordem com ganho estacionário igual a unidade, descrito a seguir:

$$f(Z) = \frac{1 - \alpha_f}{1 - \alpha_f Z^{-1}} \quad \text{com} \quad \alpha_f = e^{\frac{-\Delta t}{\tau_f}} \quad (20)$$

onde Δt é o instante de amostragem e τ_f a constante de tempo do filtro.

A constante do filtro α_f deve variar entre zero e um e funciona como parâmetro de ajuste. Valores próximos a zero melhoram o desempenho do controlador mas torna o sistema muito sensível a erros de modelagem. Valores próximos de um melhoram a robustez do controlador porém a resposta fica muito lenta (Deshpande e Ash, 1988).

A função de transferência em malha fechada para um modelo de processo perfeito e variações no valor de referência ($L(Z) = 0$) é:

$$\frac{C(Z)}{R(Z)} = \tilde{G}_+(Z) f(Z) \quad (21)$$

O controlador IMC pode ser aplicado a sistemas de ordem mais elevadas onde os outros métodos de síntese direta não são confiáveis.

Pode também ser adicionada à estrutura de controle uma trajetória de referência ('Set Point'), que deve ser seguida pelo sistema, através de um bloco chamado $H^R(Z)$ contendo um modelo apropriado. Esse bloco pode ser combinado com o filtro dando um bloco único no diagrama de blocos.

1.2.3.2. IMC COM PREDITOR ANALÍTICO GENERALIZADO

Uma classe especial de controladores digitais é obtida pela combinação da estimativa de carga e compensação do atraso de transporte. Entre eles está o IMC com GAP que é obtido de uma expansão do diagrama de blocos IMC geral onde é incluído o bloco A^* , que é usado para prever o efeito dos distúrbios no sinal de erro do controlador, e uma função de transferência da carga $G_L(Z)$. Ver figura 4 a seguir,

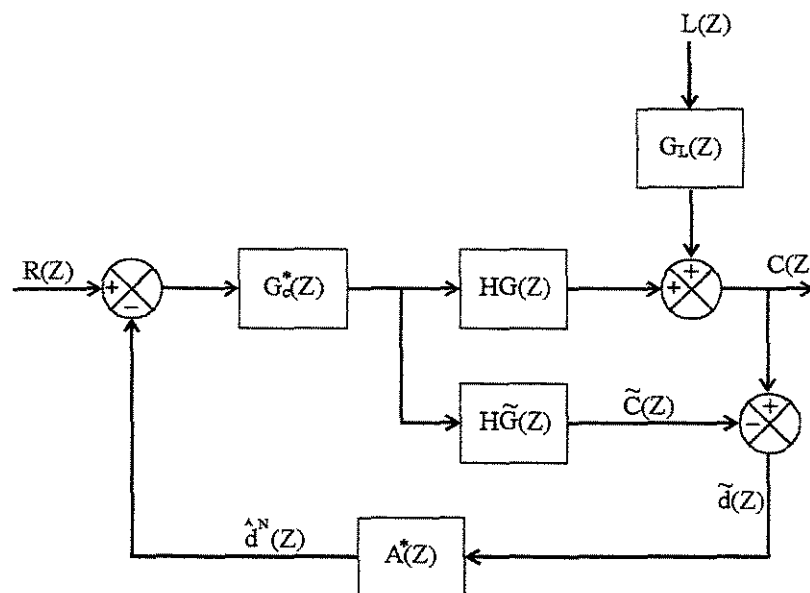


Figura 4. Diagrama de blocos do preditor analítico

O preditor analítico é um algoritmo usado para compensar a ação de distúrbios na carga quando esses não são medidos e também para otimizar o desempenho do controlador na presença de variações na carga e no 'Set Point', além de compensar o atraso de transporte. O preditor analítico discreto proposto por Doss e Moore (citados por Seborg, 1989) surgiu como uma alternativa do Preditor de Smith e é usado para compensar a ação do atraso de transporte do processo. Esse algoritmo usa o modelo do processo para prever o valor futuro da variável controlada que é utilizado como entrada do controlador (Deshpande e Ash, 1988). O tempo utilizado para predição inclui o atraso de transporte do processo e a metade do período de amostragem. Esse algoritmo tem a limitação de por exemplo considerar a função de transferência da carga igual a do processo. Surgiu então o preditor analítico generalizado (GAP) que se aplica a qualquer função de transferência (Seborg, 1989).

Para desenvolver esse algoritmo para um modelo de primeira ordem com atraso de transporte, considera-se o modelo perfeito e que $\tilde{G}(Z)$ inclui o modelo de processo mais a dinâmica dos elementos finais de controle.

O efeito de um distúrbio na entrada do processo pode ser obtido pela equação a seguir:

$$\tilde{d}(z) = C(Z) - \tilde{C}(Z) \quad (22)$$

onde:

$$C(Z) = \text{variável de saída real}$$

$$\tilde{C}(z) = \text{variável de saída do modelo do processo}$$

Considerando o atraso de transporte do modelo de processo N e que o modelo da carga é uma função de transferência de primeira ordem, é possível estimar o efeito do distúrbio na saída futura através da estimativa da variação na entrada atual L , que é mantida constante durante N passos de tempo no futuro. O horizonte de predição pode ser maior do que N . Por exemplo será selecionado igual a $N + 1$ passos. A carga L não é conhecida mais deve ser estimada a partir de $\tilde{d}(Z)$. Para isso adota-se $H\tilde{G}_L(Z)$ como sendo o modelo da carga com coeficientes \bar{a} e \bar{b} conforme a equação seguinte:

$$HG_L(Z) = \frac{\bar{b}Z^{-1}}{1 - \bar{a}Z^{-1}} \quad (23)$$

Essa equação não possui o termo com atraso de transporte e o mesmo não pode ser determinado porque o distúrbio não é medido e sim calculado pela comparação da saída real com a predita.

Considerando que a variação na carga é uma entrada em degrau, tem-se:

$$\tilde{d}(Z) = HG_L(Z)L(Z) \quad (24)$$

Considerando a função de transferência da carga $HG_L(Z)$ igual a função de transferência adotada no início $H\tilde{G}_L(Z)$ e escrevendo as duas equações acima como equação diferença, fica:

$$\tilde{d}_k = \bar{a}\tilde{d}_{k-1} + \bar{b}L_{k-1} \quad (25)$$

Se a variação em degrau na carga ocorreu no tempo $k - 1$, a carga estimada fica:

$$\hat{L}_{k-1} = \frac{1}{\bar{b}}(\tilde{d}_k - \bar{a}\tilde{d}_{k-1}) \quad (26)$$

Ou em termos da transformada Z ,

$$Z^{-1}\hat{L}(Z) = \frac{1 - \bar{a}Z^{-1}}{\bar{b}}\tilde{d}(Z) \quad (27)$$

O efeito do distúrbio na entrada do processo pode ser predito no horizonte de N espaços de tempo. Adotando uma variação em degrau na carga e simplificando a equação resultante tem-se:

$$\hat{d}_{k+N}(Z) = \bar{a}^N \tilde{d}(Z)_k + \frac{1 - \bar{a}^N}{1 - \bar{a}} \bar{b} \hat{L}_{k-1}(Z) \quad (28)$$

Como \hat{d}_k esta sujeito a erros de medição, a carga estimada é filtrada antes da predição, assim a equação 27 fica:

$$Z^{-1}\hat{L}(Z) = F_L(Z) \frac{(1 - \bar{a}Z^{-1})}{\bar{b}} \tilde{d}(Z) \quad (29)$$

Onde $F_L(Z)$ é um filtro de primeira ordem com parâmetro de ajuste β variando entre 0 e 1 descrito pela equação a seguir:

$$F_L(Z) \frac{(1-\beta)}{1-\beta Z^{-1}} \quad (30)$$

A equação de predição é obtida aplicando a transformada Z a equação 28 e combinando com a equação 29:

$$\hat{d}^N(Z) = A^*(Z) [C(Z) - \hat{C}(Z)] \quad (31)$$

Onde,
$$A^*(Z) = \bar{a}^N + \frac{1-\bar{a}^N}{1-\bar{a}} F_L(Z)(1-\bar{a}Z^{-1}) \quad (32)$$

e
$$\hat{d}^N(Z) = \tilde{d}(Z) \text{ predito N passos a frente}$$

Para calcular o controlador pode ser usada a técnica do controlador IMC porque o GAP é baseado no conceito de controle com modelo interno. A equação 32 mostra que o GAP é praticamente independente da dinâmica da função de transferência da carga. É função apenas da constante de tempo τ_L que deve ser definida. Para $\tau_L = 0$ o controlador não considera a estimativa da carga ($A^* = 1$). Para $\tau_L = 1$ se obtém a configuração do GAP com predição perfeita e, sem erros no modelo.

1.2.4. CONTROLADOR PREDITIVO COM MODELO

Nos controladores estudados até agora, baseados na transformada Z o horizonte de predição é limitado, sendo considerado igual ao atraso de transporte quando o controlador é usado para compensar os efeitos dessa variável.

Nas ultimas décadas houve um grande interesse por parte das indústrias e dos pesquisadores na utilização de modelos do processo para desenvolver novos tipos de controladores multivariável. Muitos trabalhos foram publicados com aplicações do controle preditivo com modelo (MPC) na maioria das vezes em indústrias de petróleo. Esses processo são multivariável com muitas restrições e processam grande quantidades de material. (Luyben e Luyben, 1997)

A técnica de controle preditivo com modelo é baseada na utilização de um modelo de resposta do processo a um distúrbio em degrau no domínio do tempo, para calcular

futuros valores ótimos das variáveis manipuladas, que minimizam um índice de desempenho (Luyben, 1990).

Em cada intervalo de amostragem são calculados pelo procedimento de otimização, as mudanças nas variáveis manipuladas para vários intervalos futuros. Porém só a primeira mudança é considerada como ação de controle e usada no cálculo da variável controlada. O cálculo da variável manipulada é feito para qualquer valor de tempo, limitado apenas pelo horizonte do modelo de processo, possibilitando maior precisão do controlador. Esta técnica permite a introdução de restrições nas variáveis controladas e manipuladas de uma maneira simples.

A atuação do controlador está mostrada na figura 5. Baseados no modelo, que estima o comportamento do processo no tempo futuro, são preditos vários valores para a variável controlada, e calculadas as ações de controle necessárias para corrigir o erro existente entre a variável controlada e o valor de referencia em cada instante do horizonte de predição P.

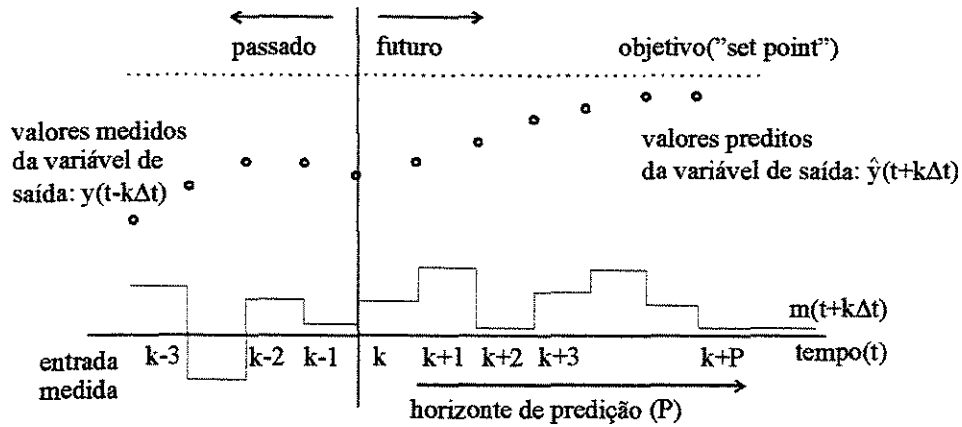


Figura 5. Esquema geral de controle preditivo

A função objetivo, que deve ser minimizada em relação à variável manipulada m , é descrita em função do erro predito para o horizonte de predição. Esse erro é expresso pela diferença entre o valor predito da variável controlada e o valor de ajuste desejado para a mesma, conforme a equação seguinte:

$$J = \sum_{i=1}^P (Y_{est(k+1)} - Y_{SP(k+1)})^2 \quad (33)$$

O controlador minimiza a função J em relação a m , obtendo assim os valores ótimos da variável manipulada, que correspondem às ações de controle ótimas para um determinado horizonte de predição P .

Essa técnica requer a definição de limites para as predições que são:

- Horizonte do modelo, de estabilidade ou de convolução N , é o número de intervalos de amostragem necessários para o processo atingir 99% da condição de estabilidade após ser submetido a uma perturbação em degrau unitário. Na literatura se recomenda adotar valores de N entre 20 e 70 que previnem problemas de truncamento e não aumenta excessivamente o esforço computacional.
- Horizonte de predição ou de otimização P , é o número de predições usadas no cálculo da otimização. Valores maiores de P implicam em maior tempo para atingir o valor de referência e maior esforço computacional. P deve ser no máximo igual a N .
- Horizonte de controle M , é o número de ações de controle calculadas no horizonte de predição P , necessárias para reduzir os erros preditos. Valores elevados de M implicam em variações excessivas na variável manipulada que provocam oscilações na saída do processo entre os instantes de amostragem, aumentando o esforço computacional e diminuindo a robustez do controlador. A literatura recomenda adotar valores de M muito menores do que P porém, valores muito baixos de M tornam o controlador insensível aos erros do modelo.

Esses limites são considerados parâmetros de ajuste do controlador e determinados na simulação do processo.

A estratégia de controle preditivo com modelo pode ser usada para diferentes modelos do processo, rotinas de otimização e especificações dos parâmetros de entrada. A combinação desses fatores geram métodos diferentes como por exemplo o controle com modelo algorítmico (MAC) (Richalet e colaboradores, 1978), o controle com matriz dinâmica (DMC) (Cutler, Ramaker, 1980) e o controle com modelo interno (IMC) (Garcia e Morari, 1982).

Os dois primeiros MAC e DMC foram desenvolvidos a partir de um modelo heurístico similar onde foram aplicadas técnicas de otimização e especificação dos parâmetros de entrada diferentes. Esse método foi introduzido na década de 70 por Cutler,

Ramaker e Richalet. Em 1978 Richalet e colaboradores aplicaram um controlador preditivo com modelo heurístico a diferentes processos industriais, atestando as vantagens do método como por exemplo a facilidade de implementação e a capacidade de lidar com as condições industriais.

Exemplo de aplicação com ênfase na análise das propriedades do algoritmo do MAC foi elaborado por Rouhani e Mehra (1982), que utilizaram um sistema com uma única entrada e uma única saída SISO.

1.2.5. CONTROLADOR PREDITIVO COM MODELO INTERNO

O controle com modelo interno IMC desenvolvido por Garcia e Morari (1982) para sistemas SISO e multivariável foi combinado com a teoria de controle preditivo com modelo para a obtenção do algoritmo do controlador preditivo com modelo interno.

Em 1982 Garcia e Morari elaboraram uma revisão do conceito de IMC e uma comparação com outros esquemas de controle mostrando que a estrutura desse controlador permite um procedimento racional de projeto onde o controlador é escolhido para se obter controle perfeito. Para isso é introduzido um filtro que torna o sistema mais robusto aos erros do modelo do processo. O que distingue o controlador IMC é a maneira direta como estão relacionados o bom desempenho com a estabilidade e a robustez do sistema, o que o torna atrativo para aplicações industriais.

Um problema que aparece no projeto de controladores que usam a estratégia IMC, é a formulação do inverso da função de transferência que descreve o controlador e garante sua estabilidade. Esse problema é minimizado através da utilização de uma trajetória de referência, que combinada com a característica de controle perfeito faz com que a saída siga a dinâmica desejada se transformando num problema típico de controle preditivo.

A estrutura do controle com modelo interno desenvolvida por Garcia e Morari foi usada junto com a técnica geral de controle preditivo na busca de uma aproximação estável para o inverso da função de transferência de modo a manter a estabilidade da planta diante dos erros do modelo do processo. Os mesmos aplicaram essa teoria a alguns sistemas para análise e comparação com outros esquemas de controladores preditivos e concluíram que os

controladores com modelo algorítmico (MAC) e com matriz dinâmica (DMC) são casos especiais da estratégia IMC, para escolhas específicas dos parâmetros de ajuste do controlador.

O modelo do processo utilizado é uma aproximação baseada na resposta ao impulso chamado modelo de convolução cujos coeficientes podem ser obtidos diretamente da resposta ao degrau. Esse modelo aproximado pode ser aplicado a qualquer sistema linear e propicia o uso de métodos de otimização. O horizonte do modelo N é determinado em função do período de amostragem e do tempo necessário para completar a resposta em malha aberta.

Os coeficientes do modelo de convolução h_i estão relacionados com os valores normalizados da resposta ao degrau unitário em malha aberta a_i da seguinte forma:

$$h_i = a_i - a_{i-1} \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (34)$$

E o modelo de convolução discreto usando os coeficientes da resposta ao impulso é dado por:

$$\hat{c}_{n+1} = c_0 + \sum_{i=1}^N h_i m_{n+1-i} \quad (35)$$

Em aplicações industriais onde existem restrições nas variáveis do processo é muito importante saber como o sistema irá se comportar num determinado tempo a frente do tempo atual de forma a se tomar as medidas corretivas necessárias. Deve-se então formular um problema de controle preditivo incluindo a estrutura de controle desejada.

O projeto do controlador segue algumas etapas:

Inicialmente é necessário prever as saídas do processo nos P futuros instantes de amostragem utilizando o modelo de resposta ao impulso definido por (Deshpande, 1988):

$$y_{M(k+r+i)} = \sum_{j=1}^N h_j m_{(k+i-j)} \quad i = 1, 2, \dots, P \quad (36)$$

onde, h_i = coeficientes do modelo de convolução

m = variável manipulada

Esta equação representa uma predição em malha aberta e não prevê nenhuma correção de erros e distúrbios que existem no sistema. É necessário então corrigir o valor da saída predita com relação à presença de possíveis erros de modelagem e distúrbios na carga. Considerando que a diferença entre o valor predito acima e o valor atual medido da variável controlada (erro predito) seja constante para todos os instantes futuros de predição, e que no instante atual o valor corrigido é igual ao valor medido, ou seja $y_k^* = y_k$, têm-se a equação da saída corrigida:

$$y_{(k+\tau+i)}^* = y_{M(k+\tau+i)} + y_{(k)} - y_{M(k)} \quad i = 1, 2, \dots, P \quad (37)$$

O parâmetro τ é o número inteiro de instantes de amostragem contidos no atraso de transporte.

O objetivo do controle é manter o valor predito corrigido o mais próximo possível do valor de referência. O valor da variável controlada que é a resposta desejada de saída do processo pode ser expresso como uma trajetória de primeira ordem do tipo descrito a seguir:

$$y_{d(k+\tau+i)} = \alpha_f y_{d(k+\tau+i-1)} + (1 - \alpha_f) R \quad \text{com, } y_{d(k+\tau)} = y_{(k)} \quad (38)$$

onde:

α_f = parâmetro do filtro que determina a velocidade da resposta ($0 < \alpha_f < 1$)

R = valor de referência

Em seguida deve-se calcular um grupo de ações de controle que façam o valor predito corrigido seguir a trajetória desejada. Para isso deve-se igualar as equações 37 e 38, e calcular as saídas futuras do controlador. Porém esse procedimento não é utilizado porque as saídas do controlador podem não ser fisicamente realizáveis. Pode-se, então, formular um problema de otimização cujo objetivo é calcular um grupo de valores da variável manipulada de forma a minimizar o índice de desempenho seguinte:

$$J = \sum_{i=1}^P \left[\gamma_i^2 (y_{d(k+\tau+i)} - y_{(k+\tau+i)}^*)^2 + \beta_i^2 (m_{(k+i-1)})^2 \right] \quad (39)$$

Sujeito a $y_{(k+\tau/k)}^* = y_{M(k+\tau)} + d_{(k+\tau/k)}$

e $m_{(k+M)} = m_{(k+M+1)} = \dots = m_{(k+P-1)} \quad M \leq P$

onde, γ_i = pesos que atenuam a ação do erro de predição sobre a variável controlada.

β_i = pesos que atenuam as variações das ações de controle (m) reduzindo a instabilidade da resposta do sistema.

$$\beta_i = 0 \quad \text{para } i > M$$

M = horizonte de controle. É o parâmetro de supressão da entrada do processo que especifica o número de intervalos no futuro nos quais é permitida variação em $m_{(k)}$. Serão calculadas M ações de controle futuras, de $m_{(k)}$ até $m_{(k+M-1)}$ reduzindo as dimensões das matrizes de P para M diminuindo o esforço computacional.

$d_{(k+\tau)}$ = desvio predito. A melhor predição é manter esse valor igual ao desvio no tempo presente ($d_{(k)}$).

A ação de controle que minimiza o índice J é a solução do problema de mínimos quadrados descrito acima que é obtida fazendo-se a derivada de J com a relação a m igualando a zero e resolvendo para m . O resultado pode ser apresentado na forma da equação a seguir que é a forma posição do algoritmo do controle preditivo IMC.

$$m_{(k)} = -\sum_{i=1}^{N-1} \phi_i m_{(k-i)} + \sum_{i=1}^P v_i [y_{d(k+\tau+i)} - (y_{(k)} - y_{M(k)})] \quad (40)$$

onde ϕ_i = são elementos da primeira linha de $s\Gamma_p\Omega$

v_i = são elementos da primeira linha de $s\Gamma_p$

$i = 1, 2, \dots, P$

s , Γ_p e Ω são vetor e matrizes que serão definidos a seguir.

$$s = b^T (T_M^T \Lambda^T R_P^T \Gamma_P^2 R_P \Lambda T_M + B_M^2)^{-1} T_M^T \Lambda^T R_P^T \Gamma_P^2 \quad (41)$$

$$\Gamma_P = \text{diagonal } (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_P) \quad \Gamma_P = \text{matriz } P \times P \quad (42)$$

$$\Omega = \begin{bmatrix} I_p & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_2 & h_3 & \dots & h_N \\ h_3 & h_4 & \dots & h_N & 0 \\ h_4 & \dots & h_N & 0 & 0 \\ \vdots & & & & \\ h_N & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} h_2 & h_3 & \dots & h_N \\ h_3 & h_4 & \dots & h_N & 0 \\ h_4 & \dots & h_N & 0 & 0 \\ \vdots & & & & \\ h_N & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

$$\Omega = \text{matriz } P \times (N-1) \quad I_p = \text{matriz } P \times P \quad (43)$$

$$\Lambda = \begin{bmatrix} h_1 & 0 & \dots & 0 \\ h_2 & h_1 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ h_N & h_{N-1} & \dots & h_1 \\ 0 & h_N & \dots & (h_1 + h_2) \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \dots & \sum_{i=1}^N h_i \end{bmatrix} \quad \Lambda = \text{matriz } (2N-1) \times N \quad (44)$$

$$R_p = \begin{bmatrix} I_p & 0 \end{bmatrix} \quad R_p = \text{matriz } P \times (2N-1) \quad (45)$$

$$B_M = \text{diagonal } (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_M) \quad B_M = \text{matriz } M \times M \quad (46)$$

$$b^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \quad b^T = \text{matriz } 1 \times (M-1) \quad (47)$$

$$T_M = \begin{bmatrix} I_M & & \\ & \vdots & 1 \\ 0 & & \vdots & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

$$T_M = \text{matriz } N \times M \quad I_M = \text{matriz } M \times M \quad (48)$$

A lei de controle pode também ser representada na forma velocidade, como:

$$\Delta m_{(k)} = - \sum_{i=1}^{N-1} \phi_i \Delta m_{(k-i)} + \sum_{i=1}^P v_i \left[y_{d(k+r+i)} - \Delta(y_{(k)} - y_{M(k)}) \right] \quad (49)$$

onde, $\Delta x_{(k)} = x_{(k)} - x_{(k-1)}$

As equações das leis de controle podem apresentar desvio em relação ao estado estacionário ('steady-state offset') quando $\beta_i \neq 0$. É necessário então usar um compensador de 'offset' definido por:

$$\Phi = \frac{1 + \sum_{i=1}^{N-1} \phi_i}{\sum_{i=1}^P v_i \cdot \sum_{i=1}^N h_i} \quad (50)$$

Para manter a robustez na presença de erros do modelo é introduzido um filtro de primeira ordem representado pela função de transferência.

$$F(Z) = \frac{1 - \alpha_f}{1 - \alpha_f Z^{-1}} \quad (51)$$

A figura 6 mostra o diagrama de blocos completo do controle preditivo com modelo interno IMC.

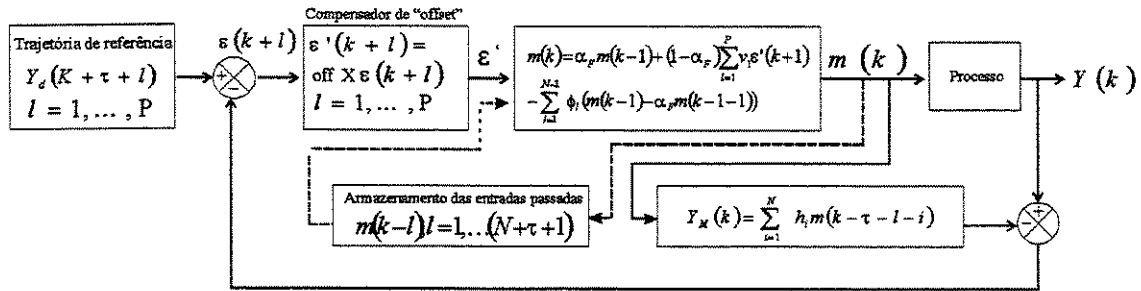


Figura 6. Controlador IMC preditivo para sistema SISO.

Além dos horizontes definidos na metodologia geral de controle preditivo com modelo, o controlador tem como parâmetros de ajuste os valores de β_i , γ_i , α_f e o intervalo de amostragem Δt . Esses parâmetros são determinados via simulação do processo a partir de estimativas sugeridas na literatura (Deshpande, 1988).

Subawalla e colaboradores (1996) elaboraram uma comparação entre os controladores baseados em modelo do processo incluindo o IMC, e o convencional em

experimentos com quatros sistemas não linear. Os mesmos comprovaram a eficiência do IMC além de ser o algoritmo mais fácil de implementar.

Segundo Zhan e Ishida, (1997) o cálculo de controle preditivo com modelo tem sido amplamente aceito pela indústria e estudado no meio acadêmico. As principais razões dessa popularidade são a maneira intuitiva do projeto e explícita de lidar com as restrições.

1.3. COMENTÁRIOS

O processo de isomerização de xilenos tem como função principal restabelecer a concentração de equilíbrio de uma mistura de compostos aromáticos produzida na unidade de recuperação de para-xileno. Essa condição de equilíbrio na saída do reator é necessária para a recuperação máxima do para-xileno que é o produto de interesse. Nesse processo a variável mais importante é a temperatura da reação que foi escolhida como variável manipulada no controle da concentração de para-xileno.

O processo sofre desativação do catalisador e esse fenômeno foi representado conforme descrito na literatura por uma aproximação exponencial simplificada que representa o processo de forma adequada.

Com relação ao tipo de controlador implementado, baseada nas informações disponíveis na literatura e no desejo de estudar uma técnica avançada de controle para aplicação ao sistema de reação catalítica foi escolhida a utilização do controlador IMC para o estudo estabelecido na proposta deste trabalho.

A técnica de controle com modelo interno foi aplicada ao reator de isomerização de xilenos e ao forno de aquecimento da mistura reagente. Também foi usado o controlador convencional PID na sua versão digital, largamente utilizados na indústria de processos químicos, para comparação dos resultados.

CAPÍTULO 2

MODELOS PARA O PROCESSO

2.1. INTRODUÇÃO

Através da simulação de um processo é possível efetuar a análise do comportamento dinâmico e a identificação das necessidades de controle do mesmo. Dessa forma torna-se necessário o conhecimento do sistema estudado e a representação dos fenômenos físicos e químicos que ocorrem neste através de um modelo matemático.

O desenvolvimento do modelo matemático é uma etapa determinante no projeto de sistemas de controle eficientes para processos químicos. Por esse motivo o modelo deve ser o mais preciso e adequado possível, envolvendo além da aplicação dos princípios básicos da engenharia química como termodinâmica, cinética e fenômenos de transporte, a utilização de dados experimentais.

O modelo matemático resultante para o sistema estudado é representado por um sistema de equações diferenciais que não possui solução analítica. A solução deste sistema de equações é obtida através da utilização de métodos numéricos apropriados e programas de computador desenvolvidos em linguagem científica. Os métodos matemáticos empregados neste trabalho para a solução do sistema de equações diferenciais foram os da aproximação por diferenças finitas e o de Runge-Kutta-Gill.

A seguir são apresentados o modelo matemático e o algoritmo dos programas desenvolvidos para a simulação do reator catalítico radial de leito fixo e fluxo centrípeto usado na isomerização de xilenos, e do forno de aquecimento da corrente de alimentação do reator.

2.2. SISTEMA DE REAÇÕES ESTUDADO

Foi estudada a reação de isomerização de xilenos em fase gasosa na presença de hidrogênio para a obtenção de para-xileno tendo como catalisador a platina suportada em zeólita.

A reação de isomerização de xilenos e de etilbenzeno (C_8 aromáticos), tem sido estudada por vários pesquisadores na busca de definição mais precisa para o seu

mecanismo, que é composto por reações complexas envolvendo intermediários naftênicos e reações paralelas como a hidrogenólise a transalquilação e o desproporcionamento entre outras.

A isomerização de xilenos é um processo de grande importância comercial fazendo parte de uma seqüência de etapas destinadas à obtenção de vários produtos aromáticos. Através desse processo procura-se maximizar a produção de para-xileno que é utilizado na obtenção do ácido tereftálico (matéria prima para a produção de fibras poliésteres, filmes, resinas, plastificastes) e produção de tintas entre outros produtos que lhe conferem um grande valor agregado.

O reator industrial típico usado nesse processo é adiabático de leito fixo com escoamento radial e fluxo centrípeto (fig. 7).

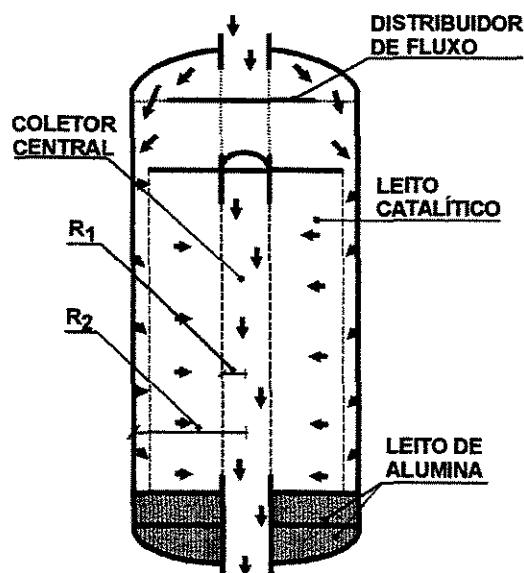


Figura 7. Reator industrial típico

A corrente de alimentação é introduzida no topo e distribuída sobre a seção transversal do reator através do distribuidor. O catalisador é colocado em uma cesta e é distribuído ao longo do eixo do reator. O produto da reação é coletado na parte central do reator e encaminhado para a saída na parte inferior do mesmo. O catalisador utilizado é esférico, bifuncional, contendo sítios ácidos (zeólita - suporte) e sítios metálicos (platina).

A alimentação é uma corrente secundária da unidade de recuperação de para-xileno contendo em média 19% de etilbenzeno, 1% de para-xileno 5% de meta-xileno e 15% de orto-xileno, e hidrogênio para promover a isomerização dos xilenos e prevenir a formação de coque na superfície do catalisador.

2.2.1. PROCESSO INDUSTRIAL

O processo industrial está representado na figura 8.

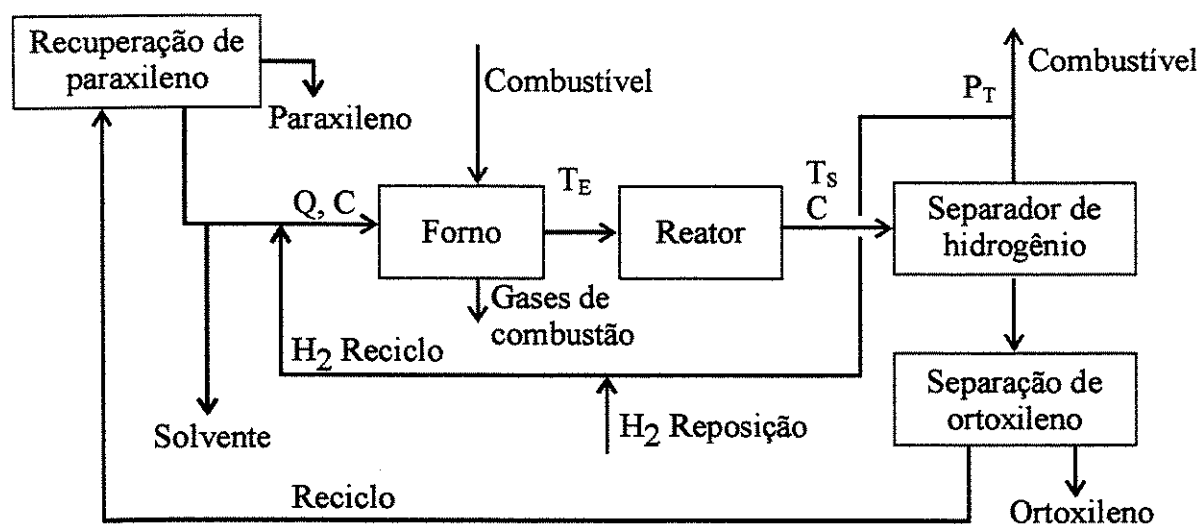


Figura 8. Processo Industrial

A corrente vinda da unidade de adsorção do para-xileno junta-se à corrente de reciclo de hidrogênio, usada para manter um teor desse gás necessário para reduzir a formação de coque no catalisador. O reciclo de hidrogênio possui uma entrada de hidrogênio de reposição, que visa complementar a quantidade desse gás na corrente de saída do separador, de modo a manter a concentração necessária do mesmo no reciclo. Essa mistura é alimentada ao forno, onde é aquecida e vaporizada através da queima de combustível. Em seguida, é alimentada ao reator.

No reator de isomerização de xilenos, a mistura de isômeros aromáticos tem sua concentração de equilíbrio restabelecida na temperatura normal de operação. Também ocorre a conversão de etilbenzeno em xilenos e são craqueados os hidrocarbonetos saturados existentes na corrente de alimentação, que são contaminantes para outros produtos da unidade industrial.

O efluente do reator é enviado para um separador, cuja fase gasosa será usada como combustível e como reciclo de hidrogênio para a isomerização de xilenos. A fase líquida segue para a purificação e obtenção dos produtos para o orto-xileno.

A influência das variáveis do processo está descrita na literatura (Pires, 1997). Uma elevação na temperatura da reação implica em um acréscimo da intensidade da reação que é observada através do crescimento da tendência ao equilíbrio dos xilenos. Essa influência é utilizada na compensação da queda de atividade do catalisador. Porém, a elevação da temperatura tem um efeito negativo pois aumenta a perda de anéis aromáticos C_8 .

A pressão parcial do hidrogênio exerce grande influência na reação de conversão do etilbenzeno, sendo função de outro parâmetro que é a relação molar hidrogênio/hidrocarbonetos, que interfere na atividade do catalisador e na perda de anéis aromáticos. Outro fator importante que afeta a conversão do etilbenzeno é a fração molar de C_8 naftênicos na saída do reator, que depende da pressão parcial do hidrogênio, da temperatura e da cinética da reação.

2.2.2. CINÉTICA DA REAÇÃO

O modelo cinético da reação adotado foi obtido da literatura e proposto por Cortes e Corman (1980) citado por Bahtia e colaboradores (1989). Neste modelo são consideradas a reação de isomerização e as duas maiores reações paralelas, que são a hidrogenólise e o desproporcionamento dos xilenos. Além dessas reações, são consideradas a isomerização do etilbenzeno e o desproporcionamento do tolueno.

Reação principal: ISOMERIZAÇÃO DE XILENOS

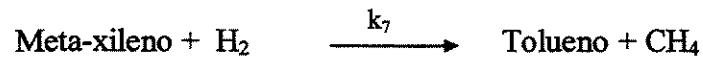
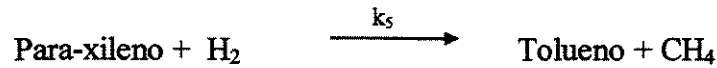


$$-r_P = r_1 - r_2 = (k_1 \cdot K_P \cdot p_P - k_2 \cdot K_M \cdot p_M) \cdot \frac{1}{1 + \sum_{i=1}^3 K_i \cdot p_i} \quad (52)$$

$$-r_O = r_4 - r_3 = (k_4 \cdot K_O \cdot p_O - k_3 \cdot K_M \cdot p_M) \cdot \frac{1}{1 + \sum_{i=1}^3 K_i \cdot p_i} \quad (53)$$

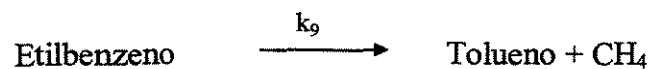
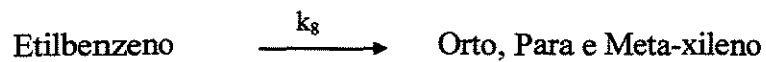
$$-r_M = r_2 + r_3 - r_1 - r_4 = [(k_2 + k_3) \cdot K_M \cdot p_M - k_1 \cdot K_P \cdot p_P - k_4 \cdot K_O \cdot p_O] \cdot \frac{1}{1 + \sum_{i=1}^3 K_i \cdot p_i} \quad (54)$$

Reação paralela 1: HIDROGENÓLISE



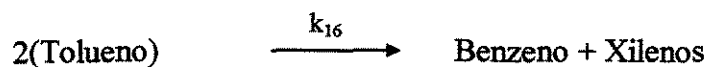
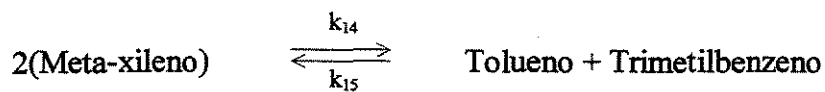
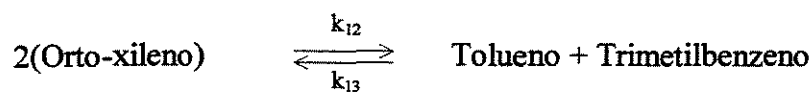
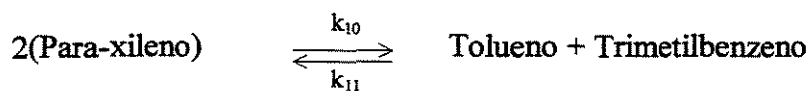
$$-r_H = (k_5 \cdot p_P + k_6 \cdot p_O + k_7 \cdot p_M) \cdot p_H \quad (55)$$

Reação paralela 2: ISOMERIZAÇÃO DO ETILBENZENO



$$-r_{EB} = k_8 \cdot p_{EB} + k_9 \cdot p_{EB} \quad (56)$$

Reação paralela 3: DESPROPORCIONAMENTO DE XILENOS E TOLUENO



$$-r_{TB} = (k_{11} + k_{13} + k_{15}) \cdot p_{TB} \cdot p_T - (k_{10} \cdot p_P^2 + k_{12} \cdot p_O^2 + k_{14} \cdot p_M^2) \quad (57)$$

$$-r_T = (k_{11} + k_{13} + k_{15}) \cdot p_{TB} \cdot p_T - (k_{10} \cdot p_P^2 + k_{12} \cdot p_O^2 + k_{14} \cdot p_M^2) + k_{16} \cdot p_T^2 \quad (58)$$

As equações das taxas de reação resultantes para cada componente são apresentadas a seguir:

a) Para-xileno

$$-r_P = r_1 - r_2 + r_5 - r_8 + r_{10} - r_{11} - r_{16} \quad (59)$$

b) Orto-xileno

$$-r_O = r_4 - r_3 + r_6 - r_8 + r_{12} - r_{13} - r_{16} \quad (60)$$

c) Meta-xileno

$$-r_M = r_2 + r_3 - r_1 - r_4 + r_7 - r_8 + r_{14} - r_{15} - r_{16} \quad (61)$$

d) Hidrogênio

$$-r_H = r_5 + r_6 + r_7 \quad (62)$$

e) Etilbenzeno

$$-r_{EB} = r_8 + r_9 \quad (63)$$

f) Trimetilbenzeno

$$-r_{TB} = r_{11} - r_{10} + r_{13} - r_{12} + r_{15} - r_{14} \quad (64)$$

g) Tolueno

$$-r_T = -r_{10} + r_{11} - r_{12} + r_{13} - r_{14} + r_{15} + r_{16} \quad (65)$$

2.2.3. CINÉTICA DA DESATIVAÇÃO DO CATALISADOR

A desativação de catalisadores por depósitos de compostos de carbono ocorre com frequência nas indústrias de processamento de petróleo e petroquímicas provocando consequências negativas na operação dessas plantas. Processos onde ocorre formação de coque (compostos de carbono) não atingem um estado estacionário e a temperatura deve ser elevada para compensar a redução na velocidade da reação devida à desativação do catalisador. A desativação de catalisadores ocorre por vários motivos porém no processo de isomerização de xilenos a causa principal é o depósito de carbono (Henriques e colaboradores, 1997 e Morin e colaboradores, 1998), esse fenômeno foi introduzido no

modelo dinâmico do reator para proporcionar uma descrição mais precisa do sistema em estudo.

Existem vários trabalhos sobre o mecanismo da formação de depósitos de carbono no catalisador. Foram identificadas como etapas desse mecanismo, a adsorção seguida de reação química dos reagentes e produtos, resultando na formação de depósitos de baixa volatilidade. A tendência para a formação de coque é maior nos aromáticos que são adsorvidos mais facilmente do que os hidrocarbonetos saturados, segundo Eberly e colaboradores (1966).

No caso das zeólitas, investigadas por Henriques (1997), os depósitos, formados por todos os compostos de carbono resultantes da reação, poliaromáticos ou não, são retidos nos poros e na superfície do catalisador. O conhecimento da composição do coque é importante para o ajuste de modelos que descrevem a formação de depósitos e para a desativação do catalisador. O equilíbrio químico da mistura e as causas da retenção do coque são influenciadas pela temperatura de forma acentuada.

A cinética da desativação tem também vários modelos propostos na literatura porém o mais aceito atualmente é o modelo geral, resultante da aplicação da equação da continuidade ao processo de formação de coque, conforme equação a seguir:

$$\frac{dC_c}{dt} = r_c \quad (66)$$

Essa equação expressa a taxa de formação de coque e como as outras taxas de reação dos componentes da mistura é função das variáveis do processo. Todas as reações têm a velocidade alterada devido a influência da formação e depósito de compostos de carbono na atividade do catalisador. Essa influência é expressa em termos da função de desativação, ϕ , que multiplica todas as taxas de reação calculadas para a condição de ausência de coque no catalisador, inclusive a equação de formação do coque. Assim,

$$r_i = r_{i,0} \cdot \phi \quad \text{e} \quad r_c = \frac{dC_c}{dt} = r_{c,0} \cdot \phi \quad (67)$$

Várias expressões foram testadas para descrever ϕ (Froment e Bischoff, 1962). A mais adequada, e que é usada atualmente, é uma equação empírica simplificada de forma exponencial que relaciona a desativação do catalisador com a concentração de coque formado, mostrada a seguir (De Pauw e Froment, 1975).

$$\phi = \exp(-\alpha C_C) \quad (68)$$

A função de desativação é expressa em termos do conteúdo de carbono no catalisador e não em função do tempo. Como existe um perfil de concentração de carbono no leito catalítico (De Pauw e Froment, 1975), a função de desativação do catalisador também varia ao longo do leito. O parâmetro de desativação α é função das variáveis do processo e seu valor neste estudo foi determinado através de simulação.

A taxa de formação de coque é função da composição da mistura reagente, da temperatura e da atividade do catalisador. Para a descrição dessa taxa, foram testadas varias equações empíricas e outras baseadas em conceitos teóricos e a que melhor se ajustou aos dados experimentais (Dumez e Froment, 1976) mostra que a taxa é diretamente proporcional a soma dos produtos de uma constante pela pressão parcial dos componente da mistura reagente. A variação da constante da taxa de formação de coque com a temperatura segue a lei de Arrhenius (De Pauw e Froment, 1975),

Neste estudo, foi considerada que a taxa de formação de coque é diretamente proporcional à soma das pressões parciais dos componentes principais da mistura reagente que são para-xileno, orto-xileno e meta-xileno. A equação da taxa de formação de coque considerada é então:

$$\frac{dC_C}{dt} = K_{C_C} \cdot (P_{P-X} + P_{O-X} + P_{M-X}) \cdot \phi \quad (69)$$

A constante da taxa de formação de coque K_{C_C} e o parâmetro de desativação α foram determinados na simulação do reator considerando que a desativação do catalisador ocorre em 200 horas. Os valores encontrados são $K_{C_C} = 8,0 \cdot 10^{-3}$ e $\alpha = 100$. Esse tempo corresponde a vida útil do catalisador que num processo industrial é de um a dois anos. Ao final desse tempo a carga de catalisador deve ser regenerada ou descartada, o que implica

em custo. O controle e a otimização do processo são determinantes para a prorrogação da vida útil do catalisador.

As aproximações utilizadas neste estudo permitem descrever o sistema de forma coerente e atendem ao objetivo final que é permitir a proposta de um sistema de controle para o reator que está submetido à condição de desativação do catalisador.

2.3. MODELO DO REATOR

Para o reator foi desenvolvido um modelo dinâmico pseudo-homogêneo de parâmetros concentrados, com modelo cinético completo, ou seja, que considera a reação principal de isomerização de xilenos e as reações paralelas de hidrogenólise, isomerização e desproporcionamento do etilbenzeno e desproporcionamento de xilenos e tolueno. O modelo dinâmico desenvolvido para o reator é formado por equações diferenciais parciais não lineares que representam os balanços de massa e energia, e admite as seguintes hipóteses simplificadoras:

- o modelo é unidimensional.
- a mistura reagente é um gás ideal.
- na entrada do leito catalítico o vetor velocidade só tem componente radial.
- não existe formação de caminhos preferenciais para o escoamento.
- o modelo pseudo-homogêneo é válido.
- a transferência de calor pelas extremidades do reator é desprezível.
- não há ocorrência de reações químicas nas regiões fora do leito catalítico.
- não há variação de pressão e temperatura nas regiões fora do leito catalítico.
- as transferências de massa e energia ocorrem devido à difusão e à condução de calor, respectivamente.
- as partículas do catalisador são esféricas.
- a difusividade e a condutividade térmica são constantes.
- a operação do reator é adiabática e o fluxo de calor na parede é zero.

2.3.1. BALANÇO DE MASSA NO LEITO CATALÍTICO

Para realizar o balanço de massa considera-se a ocorrência das reações químicas em um reator tubular com escoamento radial e fluxo centrípeto cujo elemento diferencial de volume está mostrado na figura 9.

O balanço de massa é obtido pela aplicação do princípio da conservação da massa à espécie i no elemento de volume anular ΔV , fixo no espaço, através do qual a mistura reagente está fluindo.

Dentro desse elemento, i pode ser produzido por reação química a uma taxa R_i baseada no volume de fluido.

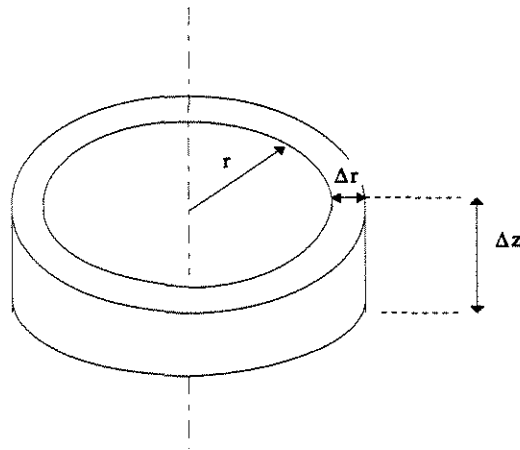


Figura 9. Elemento de volume anular

As contribuições do balanço de massa são:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{taxa de acúmulo} \\ \text{de } i \text{ dentro do} \\ \text{elemento de volume} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{taxa de entrada} \\ \text{de } i \text{ no elemento} \\ \text{de volume} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{taxa de saída} \\ \text{de } i \text{ no elemento} \\ \text{de volume} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{taxa de produção de } i \\ \text{por reação química no} \\ \text{elemento de volume} \end{array} \right\} \quad (70)$$

A taxa da reação é avaliada na concentração e temperatura médias do gás no leito catalítico, e é escrita em função da taxa global da reação, definida como:

$$R_{G,i} = \eta R_{M,i} \quad (71)$$

onde:

- η = fator de efetividade
- $R_{M,i}$ = equação da taxa intrínseca da reação
- $R_{G,i}$ = equação da taxa global da reação

Após desenvolvimento completo do modelo se obtém a equação geral do balanço de massa (Ribeiro, 1995):

$$\varepsilon_T \cdot \frac{\partial C_i}{\partial t} = D_{iz,ef} \cdot \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} - v \cdot \frac{\partial C_i}{\partial z} + D_{ir,ef} \cdot \left(\frac{\partial^2 C_i}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial C_i}{\partial r} \right) + (1 - \varepsilon_B) \cdot R_{Gi} \quad (72)$$

onde: $\varepsilon_T = [\varepsilon_B + (1 - \varepsilon_B) \cdot \varepsilon_P]$ (73)

ε_T é a porosidade total do catalisador, ε_B é a porosidade do leito catalítico e, ε_P é a porosidade da partícula de catalisador.

e,

$$D_{iz,ef} = \varepsilon_B D_{iz}$$

$$D_{ir,ef} = \varepsilon_B D_{ir}$$

$$v = \varepsilon_B v_z$$

$D_{i,ef}$ é o coeficiente de difusividade efetiva da lei de Fick.

As condições de contorno para o modelo sem dispersão axial são as seguintes:

$$z = 0 \{ C_i = C_o \quad 0 \leq r \leq R \quad (74)$$

$$r = 0, \left\{ \frac{\partial C_i}{\partial r} = 0 \right. \quad (75)$$

$$r = R, \left\{ \frac{\partial C_i}{\partial r} = 0 \right. \quad (76)$$

A condição inicial pode ser descrita por:

$$t = 0, \{C_i = C_o \quad (77)$$

2.3.2. BALANÇO DE ENERGIA NO LEITO CATALÍTICO

O balanço de energia pode ser obtido de maneira análoga ao balanço de massa, ou seja, através da aplicação do princípio da conservação da energia sobre um elemento de volume ΔV do reator, tem-se:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de energia} \\ \text{acumulada no} \\ \text{elemento de} \\ \text{volume} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de energia} \\ \text{que entra no} \\ \text{elemento de volume} \\ \text{por convecção} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de energia} \\ \text{que sai do} \\ \text{elemento de volume} \\ \text{por convecção} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa líquida de} \\ \text{calor adicionado ao} \\ \text{elemento de volume} \\ \text{por condução} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa líquida de} \\ \text{trabalho cedido} \\ \text{pelo sistema} \\ \text{às vizinhanças} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa líquida de} \\ \text{calor produzido} \\ \text{por reação} \\ \text{química} \end{array} \right\} \quad (78)$$

Seguindo o procedimento adotado no desenvolvimento do balanço de massa, obtém-se a equação geral do balanço de energia (Ribeiro, 1995):

$$\varepsilon_T \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{K_{z,ef}}{\rho \cdot c_p} \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - v \cdot \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{K_{r,ef}}{\rho \cdot c_p} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{(1 - \varepsilon_B)}{\rho \cdot c_p} \cdot \sum_{q=1}^n (-\Delta H_q) \cdot R_{Gi,q} \quad (79)$$

onde: $K_{z,ef} = \varepsilon_B K_z$

$$K_{r,ef} = \varepsilon_B K_r$$

$$v = \varepsilon_B v_z$$

$K_{r,ef}$ é a condutividade térmica efetiva na direção radial.

As condições de contorno para o modelo sem dispersão axial são as seguintes:

$$z = 0, \{T = T_o = T_w \quad 0 \leq r \leq R \quad (80)$$

A condição inicial pode ser descrita por:

$$r = 0, \left\{ \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \right. \quad (81)$$

$$r = R, \left\{ -K_{r,ef} \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right) \right|_{r=R} = h_w (T - T_w) \quad (82)$$

2.3.3. ADIMENSIONALIZAÇÃO

Com a finalidade de reduzir a possibilidade de instabilidade numérica das variáveis, provocada pela manipulação de valores de ordem de grandeza diferentes, as equações tem suas variáveis adimensionalizadas limitando a variação das mesmas ao

intervalo entre 0 e 1. Esse procedimento além de facilitar a compreensão e a resolução do sistema de equações diferenciais, simplifica a interpretação dos resultados obtidos.

São usadas as seguintes variáveis adimensionais:

$$r' = \frac{r}{R_2} \quad P_i = \frac{P_i}{P_H} \quad \tau = \frac{t \cdot v_i}{R_2} \quad \theta = \frac{T}{T_M}$$

onde: P_i - pressão parcial do componente i (atm)

P_H - pressão parcial do hidrogênio na entrada do reator (atm)

R_2 - raio na entrada do leito catalítico (cm)

Aplicando as hipóteses simplificadoras, substituindo algumas variáveis por outras mais convenientes para trabalhar e adimensionalizando as equações, obtém-se as equações específicas para o modelo do reator:

MODELO PSEUDO-HOMOGÊNEO ADIMENSIONAL

Balanço de massa

$$\frac{\partial P_i}{\partial \tau} = -\frac{1}{\varepsilon_t} \cdot \frac{\partial P_i}{\partial r'} - \frac{A_1}{\varepsilon_t} \cdot (-R_{im}); \quad A_1 = \frac{P_i \cdot R_2 \cdot (1 - \varepsilon_L) \cdot \rho_P \cdot PM}{P_H \cdot G_o} \quad (83)$$

Balanço de energia

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = -\frac{1}{\varepsilon_t} \frac{\partial \theta}{\partial r'} - A_2 \sum_{q=1}^n (\Delta H_q) (-R_{qm}); \quad A_2 = \frac{(1 - \varepsilon_L) \cdot \rho_P R_2}{G_o \cdot C_P \cdot \varepsilon_t \cdot T_M} \quad (84)$$

Com as seguintes condições de contorno e condições iniciais:

$$\text{Para } r' = \frac{R_1}{R_2} \Rightarrow \frac{\partial P_i}{\partial r'} = 0 \text{ e } \frac{\partial \theta}{\partial r'} = 0$$

$$\text{Para } r' = \frac{R_2}{R_2} = 1 \Rightarrow P_i = \frac{p_{io}}{p_H} \text{ e } \theta = \frac{T_o}{T_M}$$

Aplicando o método das diferenças finitas para trás em relação a r (raio) o sistema de equações diferenciais parciais que representa o modelo do reator é reduzido ao sistema de equações diferenciais ordinárias apresentado a seguir.

Balanço de massa

$$\frac{dP_{i,j}}{d\tau} = -\frac{1}{\varepsilon_t} \cdot \frac{P_{i,j} - P_{i,j-1}}{\Delta r'} - \frac{A_1}{\varepsilon_t} \cdot (-R_{im}) \quad (85)$$

Balanço de energia

$$\frac{d\theta_j}{d\tau} = -\frac{1}{\varepsilon_t} \frac{\theta_j - \theta_{j-1}}{\Delta r'} - A_2 \sum_{q=1}^n (\Delta H_q) (-R_{qm}) \quad (86)$$

Condições de contorno

$$\tau = 0 \text{ e } r' = \frac{R_2}{R_2} = 1 \Rightarrow P_i = \frac{p_{io}}{p_H} \text{ e } \theta = \frac{T_o}{T_M}$$

A adimensionalização das equações da taxa de reação foi feita dividindo e multiplicando todas as pressões parciais destas equações pela pressão parcial do hidrogênio na entrada do reator. Como exemplo, a seguir tem-se as equações do balanço para o componente para-xileno, no primeiro ponto da malha ($j=2$). O ponto que indica o início do leito catalítico ($j=1$) é representado pelas condições de contorno. Para os outros componentes o processo é o mesmo.

Balanço de massa

$$\frac{dP_{P,2}}{d\tau} = -\frac{1}{\varepsilon_t} \frac{P_{P,2} - P_{P,1}}{\Delta r} - \frac{A_1}{\varepsilon_t} \left[\frac{(k_1 \cdot K_P \cdot P_{P,2} - k_2 \cdot K_M \cdot P_{M,2}) \cdot \frac{P_H}{1 + (K_P \cdot P_{P,2} + K_O \cdot P_{O,2} + K_M \cdot P_{M,2}) P_H} + k_5 \cdot P_{P,2} \cdot P_H^2}{-0,21 \cdot k_8 \cdot P_{EB,2} \cdot P_H + k_{10} \cdot P_{P,2}^2 \cdot P_H^2 - k_{11} \cdot P_{TB,2} \cdot P_{T,2} \cdot P_H^2 - 0,12 \cdot k_{16} \cdot P_{T,2}^2 \cdot P_H^2} \right] \quad (87)$$

Balanço de energia

$$\frac{d\theta_2}{d\tau} = -\frac{1}{\varepsilon_t} \frac{\theta_2 - \theta_1}{\Delta r} - A_2 \sum_{q=1}^n (\Delta H_q) (-R_{qm}) \quad (88)$$

Num estudo anterior (Pires, 1997) foi realizada a simulação em estados estacionário e transiente em malha aberta sem considerar a desativação do catalisador. Para analisar a adequação do modelo e estudar a dinâmica do reator com desativação do catalisador foram elaborados, neste estudo, outros programas e feita a simulação do reator em estado transiente considerando as equações apresentadas anteriormente. Porém, a adimensionalização das mesmas foi feita em relação a um valor máximo da pressão parcial de hidrogênio na entrada do reator, ou seja um valor que não deverá ser atingido. Este procedimento foi necessário devido ao fato da pressão de hidrogênio ser uma variável importante do processo que deveria ser alterada para análise da dinâmica do sistema.

2.4. ALGORITMOS DOS PROGRAMAS

Para resolver o sistema de equações diferenciais obtido na modelagem do reator é necessário utilizar métodos numéricos e programas de computador desenvolvidos em linguagem científica.

Os programas para a simulação do processo foram desenvolvidos em linguagem FORTRAN que é bastante utilizada em aplicações científicas devida a sua elevada eficiência de cálculo.

Os programas fazem a simulação dinâmica utilizando as equações discretizadas do modelo transiente desenvolvido anteriormente. São calculados os perfis de concentração temperatura e atividade dentro do leito catalítico para o tempo de operação desejado, e a variação da composição e da temperatura da corrente de saída do reator com o tempo.

O método numérico utilizado é o de Runge-Kutta-Gill, que é um dos mais indicados para a solução de problemas de valor inicial descrito por equações diferenciais ordinárias.

Os programas desenvolvidos têm um algoritmo básico, onde foram acrescentadas as modificações necessárias para o cálculo desejado.

Foram elaborados quatro programas para a simulação dinâmica do reator. O primeiro determina os perfis de concentração de todos os componentes da mistura reagente e de temperatura dentro do leito catalítico a cada intervalo fixo de tempo até o tempo final desejado sem considerar a desativação do catalisador. Com os valores obtidos na saída do reator são traçadas as curvas de variação com o tempo.

O objetivo principal deste programa foi determinar o comportamento dinâmico das variáveis principais do processo, o tempo necessário para a estabilização do sistema e a composição de equilíbrio da mistura a uma dada temperatura. Além disso, foi determinante na avaliação da linguagem e do método matemático escolhidos.

Visando obter a identificação apropriada do sistema do reator, foi feito um programa para a determinação da resposta em malha aberta a uma variação em degrau nas variáveis de entrada do processo. Este é o segundo programa que é uma ampliação do primeiro que além de determinar os perfis de concentração dos componentes da mistura

reagente e de temperatura até a estabilização do sistema, introduz uma variação em degrau no valor da variável desejada na entrada do reator e calcula as variações com o tempo até o tempo final desejado.

O objetivo deste programa é determinar o comportamento das variáveis principais do processo após o mesmo ter sido perturbado nas variáveis desejadas na entrada do reator, e o tempo necessário para a estabilização do sistema na nova condição.

O terceiro programa tem o mesmo objetivo do segundo porém calcula os coeficientes da resposta ao impulso a partir dos coeficientes da resposta ao degrau necessários para a descrição do modelo de convolução usado no cálculo do controlador preditivo. Esse programa é uma modificação do segundo programa.

O quarto programa é derivado do primeiro e faz todos os cálculos que aquele faz porém, considera a desativação do catalisador. Os resultados obtidos representam de forma mais adequada o comportamento dinâmico do sistema de reação. Esse programa foi também modificado para introduzir perturbações em degrau nas variáveis de entrada, para vários valores de tempo, gerando mais informações sobre o comportamento do sistema. A desativação do catalisador causa alteração nas características do sistema e por consequência provoca a necessidade de correção nos ajustes dos controladores.

A figura 10 apresenta o fluxograma do quarto programa que considera a desativação do catalisador. As listagens dos programas se encontram no Anexo 1.

2.5. MÉTODOS NUMÉRICOS

O modelo dinâmico desenvolvido para o reator é representado por equações diferenciais parciais, que devem ser transformadas em equações diferenciais ordinárias para facilidade de cálculo. Os sistemas de equações diferenciais ordinárias são mais simples de serem resolvidos pelos métodos numéricos.

Um dos métodos mais usados para integração numérica de equações diferenciais parciais é o das diferenças finitas. As derivadas parciais são substituídas por quocientes de diferenças das variáveis independentes e o resultado é usado para a aproximação das derivadas.

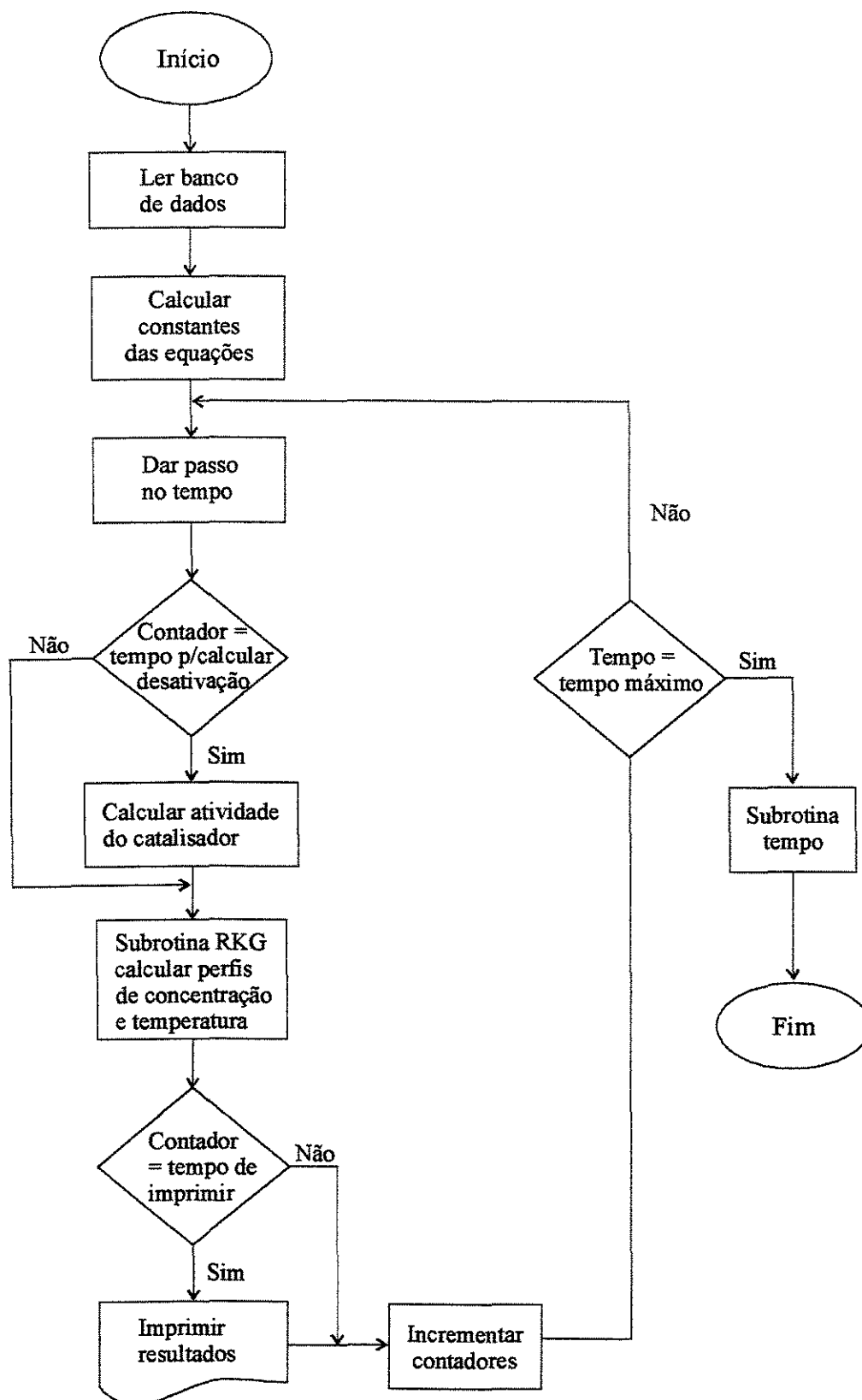


Figura 10. Fluxograma do algoritmo de simulação do reator.

Considerando a função y de duas variáveis independentes x e z , cujo domínio é bidimensional e pode ser representado por uma superfície plana, os valores de y em dois pontos (x, z) e $(x+h', z+k')$ estão relacionados através da expansão em série de Taylor.

Considerando a grade de pontos da figura 11 e expandindo em série de Taylor $y_{i-1,j}$ e $y_{i+1,j}$ em torno do valor central $y_{i,j}$, obtém-se duas expressões que isoladas e adicionadas ou subtraídas uma da outra fornecem as expressões de diferenças finitas para a primeira e segunda derivadas no ponto (i, j) .

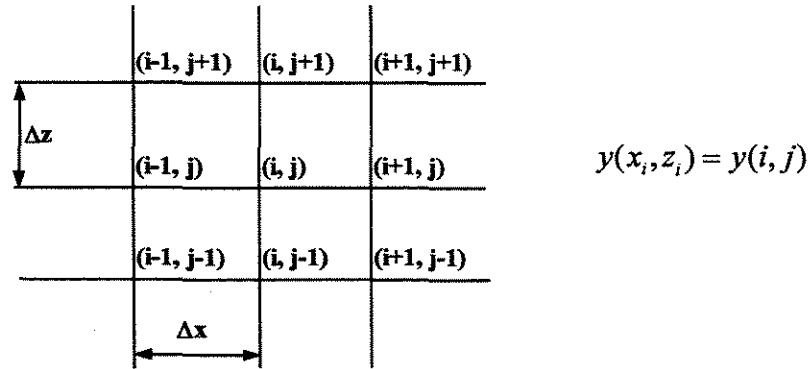


Figura 11. Grade de pontos

Para obtenção das equações do balanço foi usada a expressão das diferenças finitas para trás, aplicada à primeira derivada, mostrada a seguir (Carnaham e colaboradores, 1969):

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{y_{i,j} - y_{i-1,j}}{\Delta x} \quad (89)$$

O método das diferenças finitas foi aplicado em relação à variável r (raio do reator) que possui domínio restrito e definido. A taxa e o calor de reação são avaliados em cada ponto de divisão do leito catalítico Q . Δx na equação acima corresponde a Δr , que é o seguimento do raio entre dois pontos consecutivos de divisão do leito catalítico.

Para a solução do sistema de equações do modelo foi escolhido o método de Runge-Kutta-Gill (Carnaham e colaboradores, 1969 e Conte e colaboradores, 1981). Este é o método de Runge-Kutta mais utilizado, na solução aproximada das equações diferenciais ordinárias, devido à sua estabilidade e precisão. A praticidade desse método está ligada ao fato de necessitarem apenas o cálculo da própria função $f(x, y)$, em pontos selecionados

em cada intervalo. Os parâmetros requeridos pelo método são: o valor inicial $y_0 = y(x_0)$, o intervalo ou passo de integração h , e um limitante para o final do cálculo.

Foram incrementadas neste estudo as equações de variação das pressões parciais dos componentes da mistura e da temperatura com o tempo, de acordo com a equação do método, mostrada a seguir:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4), \quad n = 0, 1, \dots, m-1 \quad (90)$$

$$\left. \begin{aligned} K_1 &= f(x_n, y_n) \\ K_2 &= f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1\right) \\ K_3 &= f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_2\right) \\ K_4 &= f(x_n + h, y_n + hK_3) \end{aligned} \right\}$$

onde,

h = passo de integração.

K_i = funções que aproximam derivadas em vários pontos do intervalo.

2.5.1. PARÂMETROS DO MÉTODO NUMÉRICO

O método numérico requer o fornecimento dos valores dos parâmetros que foram obtidos pelo método de tentativa e erro. O passo é dado no tempo adimensional. O final do cálculo foi limitado pelo tempo de simulação desejado pelo usuário.

Os parâmetros e os valores adotados neste estudo para uso do método de Runge-Kutta-Gill estão listados a seguir:

Tempo de integração.....Vários

Passo de integração.....0,001

Condições iniciais..... $P_{T,0} = 14,52$ atm

$T_o = 673$ K

2.6. MODELO DO FORNO

A temperatura do reator de isomerização de xilenos é mantida através do aquecimento da corrente de alimentação. Essa corrente é formada por hidrocarbonetos e hidrogênio e é aquecida num forno através da queima de um combustível. O forno industrial normalmente é do tipo caixa com tubos, dispostos em forma de serpentina, por onde passa internamente a corrente a ser aquecida conforme mostrado na figura 12. Por fora da serpentina circulam os gases resultantes da combustão que são eliminados através da chaminé. A troca de calor num forno se dá por condução, convecção e radiação sendo prejudicada pela ocorrência de corrosão e de formação de depósitos de carbono na superfície dos tubos. Para aumentar o aproveitamento do calor e também por segurança, as paredes do forno são revestidas internamente com material refratário.

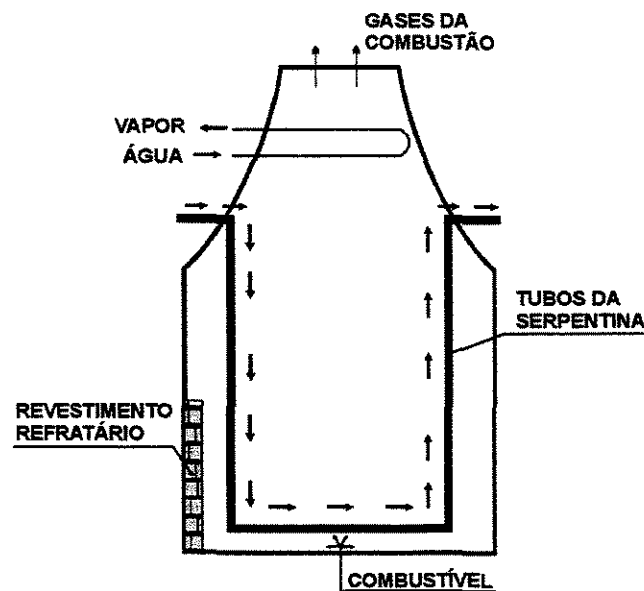


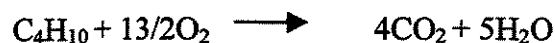
Figura 12. Forno industrial típico

Para este estudo foi considerado que não existe perda de calor, ou seja, todo o calor gerado na queima do combustível é usado para o aquecimento da corrente de alimentação do reator. Num processo industrial parte desse calor é usado para geração de vapor na serpentina instalada na saída dos gases de combustão. A temperatura dentro do forno é um valor médio das temperaturas nas várias seções do mesmo e é igual à temperatura da corrente de saída. Também, o fluido de processo e o combustível são considerados gases ideais e, o calor específico e a massa específica do fluido de processo não variam com o tempo. Foi utilizado um modelo dinâmico onde o tempo é a única variável independente.

2.6.1. BALANÇO DE MASSA NO SISTEMA DE COMBUSTÃO

Em fornos industriais utiliza-se normalmente combustíveis líquidos e gasosos que podem ser adquiridos de refinarias de petróleo ou podem ser gases residuais dos próprios processos da planta. Considera-se como calor disponível toda a quantidade de calor gerada numa combustão completa onde a água formada é mantida no estado de vapor. Neste estudo o combustível considerado é o gás natural que tem composição típica mostrada na tabela 6 do Anexo 2.

O comburente, que é o ar atmosférico com composição típica de 79 % de nitrogênio e 21 % de oxigênio, é alimentado ao forno nas condições ambientes de 298K e 1,0 atm. Para garantir a combustão completa o ar é utilizado em excesso. Neste caso, foi adotado um excesso de ar de 30% em relação ao estequiométrico. Foram considerados como base de cálculo, um mol do combustível seco e as reações estequiométricas básicas da combustão completa listadas a seguir,



O cálculo do balanço de massa no sistema de combustão apresenta como resultado a seguinte composição para os gases de saída:

$$\text{CO}_2 = 1,36 \text{ moles} = 7,11\%; \quad \text{O}_2 = 3,23 \text{ moles} = 16,90\%$$

$$\text{H}_2\text{O} = 2,36 \text{ moles} = 12,35\%; \quad \text{N}_2 = 12,16 \text{ moles} = 63,63\%$$

2.6.2. BALANÇO DE MASSA NO FLUIDO DE PROCESSO

Considerando que a mistura reagente que alimenta o reator de isomerização de xilenos não sofre acúmulo de massa nem reação química na passagem pelo interior do forno, o balanço de massa é simplificado para:

$$\text{vazão entrada} = \text{vazão saída} = 23,21 \text{ kg/s} \quad (91)$$

2.6.3. BALANÇO DE ENERGIA NO SISTEMA DE COMBUSTÃO

Considerando que não existe trabalho realizado pelo sistema sobre a vizinhança e que a taxa de energia acumulada no sistema é desprezível, o balanço de energia é simplificado para:

$$\sum n_i (h_{f,i}^0 + \Delta h_i)_S = \sum n_i (h_{f,i}^0 + \Delta h_i)_E + Q \quad (92)$$

onde:

$$Q = \text{calor liberado na combustão (cal/s)}$$

$$h_{f,i}^0 = \text{entalpia de formação do componente } i \text{ (cal/mol)}$$

$$\Delta h_i = \text{variação de entalpia do componente } i \text{ (cal/mol)}$$

$$n_i = \text{número de moles do componente } i \text{ (mol/s)}$$

O resultado do cálculo do balanço de energia do sistema de combustão é o calor gerado pela combustão do gás natural.

$$\text{Calor gerado} = - 20.849,16 \text{ cal/mol}$$

O calor total liberado pelo combustível e que será absorvido pelo fluido de processo é:

$$Q = \text{calor gerado (cal/mol)} \times \text{vazão de combustível (mol/s)}$$

A vazão do combustível varia em função da temperatura desejada na saída do forno.

2.6.4. BALANÇO DE ENERGIA NO FLUÍDO DE PROCESSO

As simplificações adotadas neste caso se referem a não existência de trabalho realizado pelo sistema nas vizinhanças e na não ocorrência de reação química. O sistema é projetado para fornecer energia à corrente de processo elevando a sua temperatura. A equação final do balanço é:

$$\frac{dE}{dt} = \left(\sum n_i \cdot h_i \right)_E - \left(\sum n_i \cdot h_i \right)_s + Q \quad (93)$$

onde:

$$Q = \text{calor absorvido da combustão (cal/s)}$$

$$n_i = \text{número de moles do componente } i \text{ (mol/s)}$$

$$h_i = \text{entalpia do componente } i \text{ (cal/mol)}$$

$$\frac{dE}{dt} = \text{termo de acúmulo de energia (cal/s)}$$

A energia acumulada neste caso é a energia interna do sistema descrita por:

$$\Delta U = mc_p \Delta T \quad (94)$$

Substituindo na equação 93 e rearrumando obtém-se a equação final:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{Q + m(h_i - h_s)}{\rho c_p \cdot V} \quad (95)$$

onde:

$$\frac{dT}{dt} = \text{taxa de variação de temperatura do fluido de processo com o tempo (K/s)}$$

$$\rho = \text{massa específica média do fluido de processo (g/mol)}$$

C_p = calor específico do fluido de processo (cal/mol.K)

V = volume da tubulação (da serpentina) do forno.

O calor específico da mistura de hidrocarbonetos e hidrogênio, varia com a temperatura. Os dados utilizados na simulação foram obtidos da literatura disponível (Reid, Prausnitz, Serwood, 1977) e se encontram no Anexo 2.

2.7. COMENTÁRIOS

Modelos de processo permitem um melhor conhecimento do comportamento do processo e auxiliam na obtenção das condições ótimas de operação e na elaboração de projetos dos sistemas de controle. A obtenção de modelos precisos que representem a realidade do processo requer tempo e custo elevado e, devido às características físicas e químicas do processo nem sempre é possível se obter a precisão desejada. Os modelos aproximados que utilizam dados reais do processo têm sido usados com sucesso como a melhor representação dos processos reais.

O modelo desenvolvido neste estudo para o reator, utiliza relações empíricas para descrever a cinética das reações envolvidas, obtidas através de experimentos em laboratório e planta piloto, o que lhes confere um grau de exatidão mais elevado.

O sistema de equações resultante do desenvolvimento do modelo do processo combinado com os modelos cinéticos da reação e da desativação do catalisador, formam um sistema complexo que deve ser resolvido com a utilização de métodos numéricos. Inicialmente foi usado o método das diferenças finitas para transformar as equações diferenciais parciais em ordinárias. O sistema resultante será resolvido através do método de integração numérica de Runge-Kutta-Gill, um dos mais usados para este propósito.

O modelo não estacionário desenvolvido para o forno considera o aproveitamento total do calor gerado na queima do combustível para o aquecimento do fluido de processo. Essa aproximação simplifica os cálculos sem comprometer o objetivo final da aplicação do modelo. A equação diferencial ordinária que representa o sistema será resolvida também pelo método de Runge-Kutta-Gill.

CAPÍTULO 3

RESULTADOS DA SIMULAÇÃO

3.1. INTRODUÇÃO

Neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos na simulação do reator de isomerização de xilenos e do forno de aquecimento da mistura reagente alimentada ao reator, necessários à identificação do processo e proposta de uma estratégia de controle para esse sistema.

Para o reator foi desenvolvido um modelo transiente que utiliza relações empíricas testadas em laboratório e planta piloto, para a descrição da cinética das reações envolvidas no processo, promovendo maior exatidão do mesmo.

No modelo não estacionário desenvolvido para o forno o tempo é a única variável independente. Foi considerado o aproveitamento total do calor gerado na queima do combustível para o aquecimento do fluido de processo. Essa aproximação simplifica os cálculos sem comprometer o objetivo final da aplicação do modelo.

3.2. RESULTADOS DA SIMULAÇÃO DO REATOR

No presente estudo foi feita a modelagem e a simulação de um sistema para a obtenção de para-xileno a partir da reação de isomerização de xilenos em fase gasosa na presença de hidrogênio em um reator catalítico de leito fixo com escoamento radial e fluxo centrípeto.

São adotadas as seguintes premissas simplificadoras, entre outras:

1. O modelo pseudo-homogêneo unidimensional é válido.
2. Operação com fluxo empistonado.
3. Operação em regime transiente.
4. Dispersão de calor e de massa desprezíveis.
5. A corrente gasosa tem densidade e capacidade calorífica média constante.
6. É desprezível o efeito de variação do volume devida a reação.
7. São consideradas todas as reações na rede, inclusive as reações paralelas.

Para os cálculos ao longo do leito catalítico foram utilizados 50 pontos distintos. Um maior número de pontos provocou alteração pouco significativa nos resultados da concentração de para-xileno: por exemplo, para 120 pontos a diferença no resultado é de +0,49%; enquanto que para o tempo de processamento a diferença é de +130%.

A simulação foi feita utilizando os dados de composição, temperatura e pressão disponíveis na literatura e de uma planta industrial. Esses dados se encontram no Anexo 2. Inicialmente foi usado o programa de simulação dinâmica com cinética completa porém sem considerar a desativação do catalisador. Quando o objetivo do estudo não envolve o controle do sistema essa aproximação é apropriada pois o sistema é diluído com hidrogênio o que reduz os efeitos da desativação do catalisador na velocidade da reação (Bahtia, 1989). A seguir são apresentados os resultados obtidos

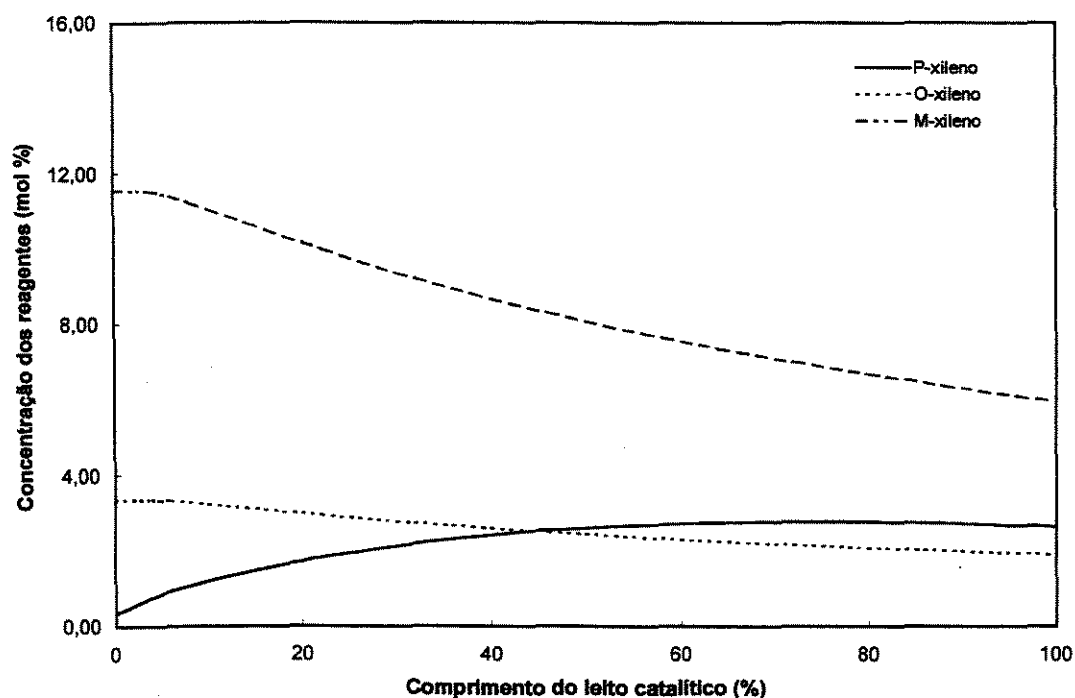


Figura 13. Perfil de concentração do reator

A figura 13. mostra os perfis de concentração para os componentes para-xileno, meta-xileno e orto-xileno, expressos em função da pressão parcial adimensional desses

componentes. A composição relativa dos três isômeros obtida na saída do reator foi 25,23% de para-xileno, 18,08% de orto-xileno e 56,69% de meta-xileno, resultados concordantes com aqueles obtidos na simulação em estado transiente feita anteriormente (Pires, 1997) e outros disponíveis na literatura (Hsu e colaboradores, 1988).

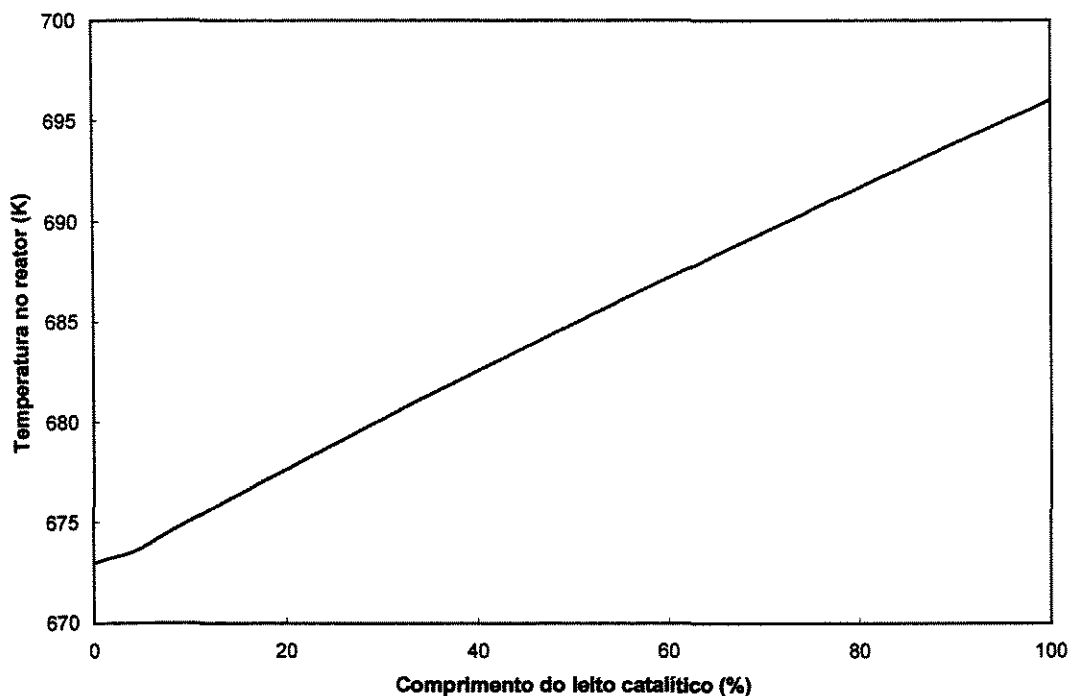


Figura 14. Perfil de temperatura do reator

O perfil de temperatura do reator após estabilização das condições operacionais encontra-se representado na figura 14. Observa-se que a temperatura, como esperado, varia linearmente com o comprimento do leito catalítico que nesse caso é o raio do reator. Constata-se que a temperatura final obtida apresenta a mesma ordem de grandeza dos valores industriais e dos apresentados na literatura (Pires, 1997).

A variação da concentração dos produtos principais da reação com a temperatura de entrada do reator a uma determinada pressão, está apresentada na figura 15. A concentração de para-xileno aumenta com a elevação da temperatura necessária para compensar os efeitos da desativação do catalisador. Essa variável é uma das mais importantes do sistema e sua elevação demasiada provoca a redução acelerada da vida útil do catalisador.

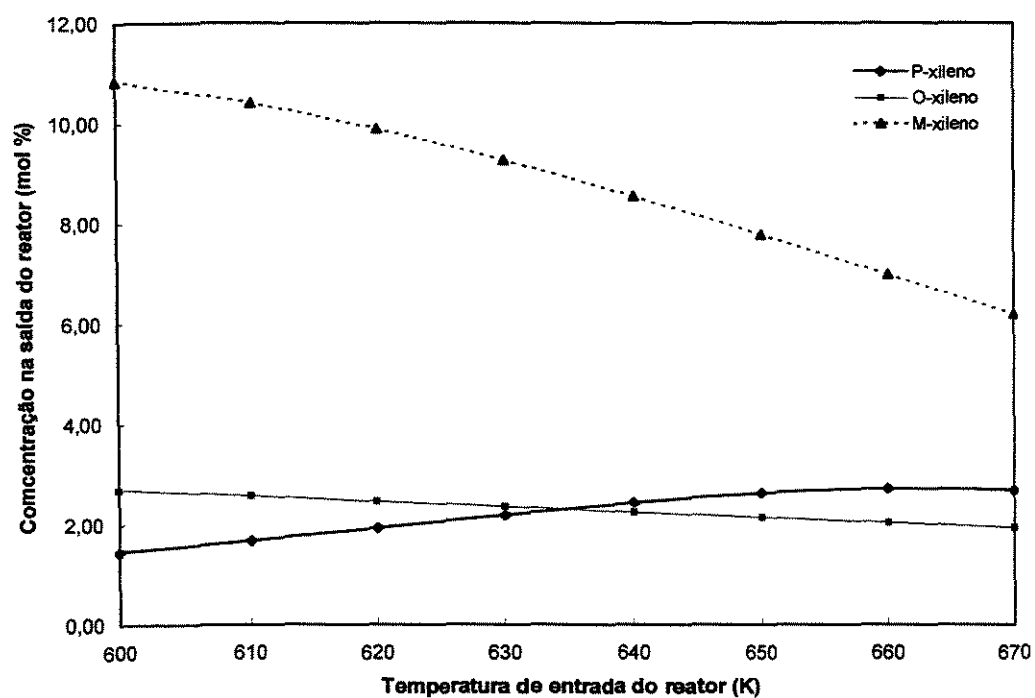
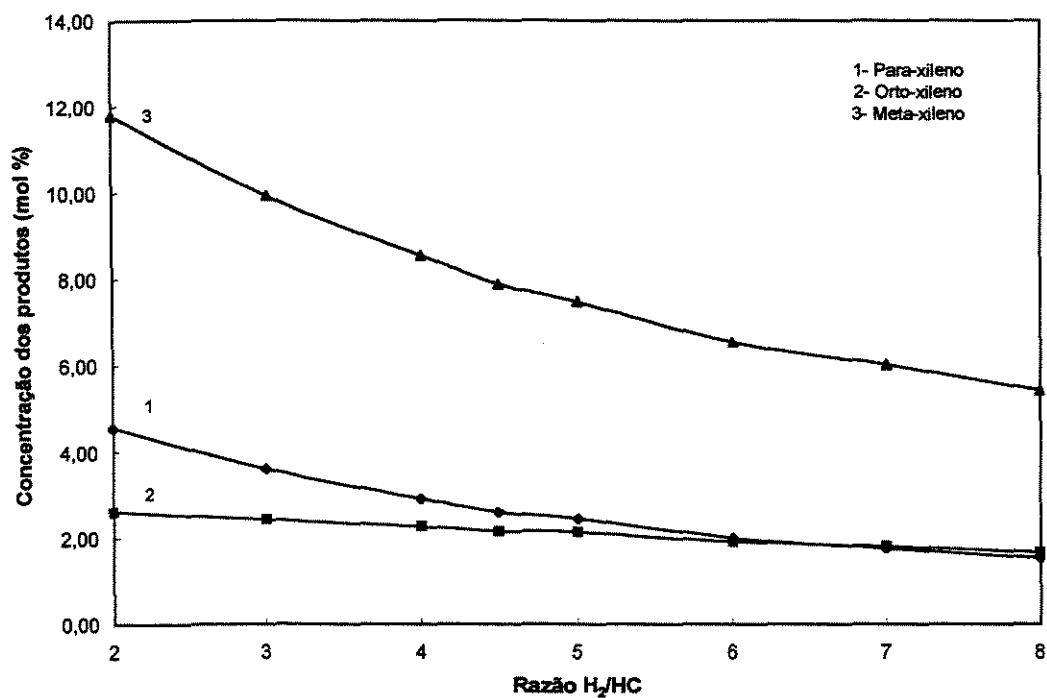


Figura 15. Variação da concentração com a temperatura de entrada do reator.

Figura 16. Variação da concentração com a relação H_2/HC

A figura 16 mostra que há redução do teor de para-xileno na mistura a medida que a relação molar entre o hidrogênio e os hidrocarbonetos aumenta porém, de acordo com estudos citados por Pires (1997), valores reduzidos da relação molar provocam queda da seletividade do catalisador, e redução da vida útil do catalisador. A escolha do valor ótimo de operação deve levar em consideração fatores técnicos e de custo.

Em seguida foi feita a simulação do sistema quando submetido a perturbações nas variáveis de entrada. Esta simulação em malha aberta teve como objetivo identificar o sistema para posterior escolha das variáveis a serem controladas e manipuladas. Foram então provocadas perturbações em degrau nas variáveis mais significativas para o processo e observado o comportamento do sistema. As perturbações foram introduzidas após o sistema alcançar a condição de operação estável. A seguir são apresentados os perfis obtidos.

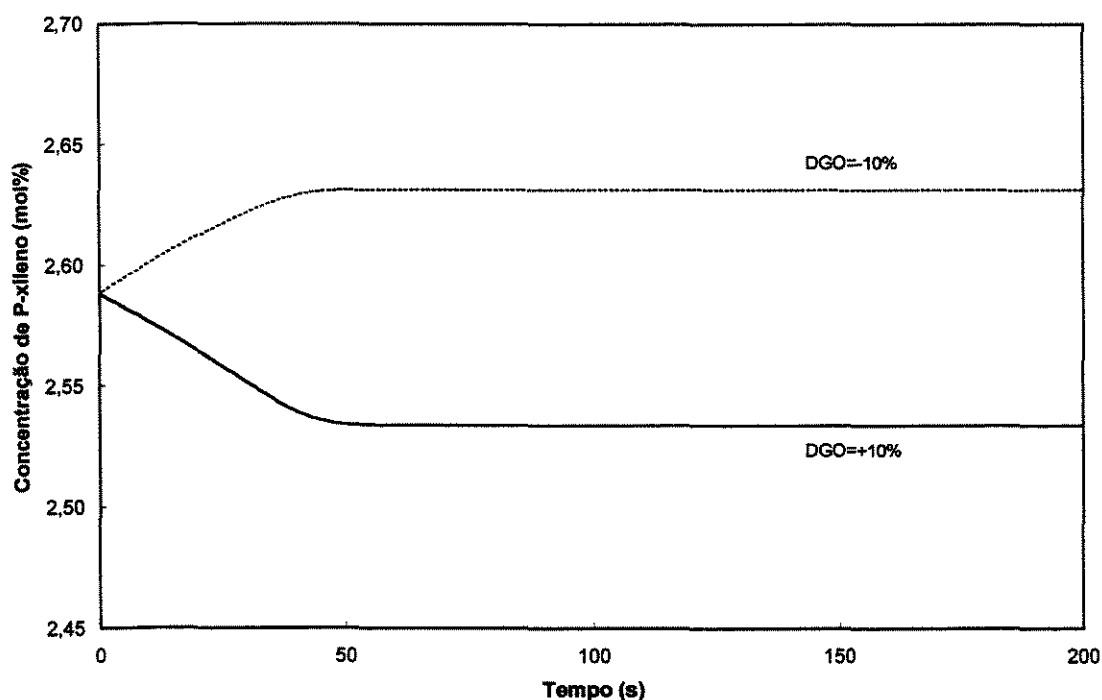


Figura 17. Comportamento da concentração de para-xileno ao ser introduzida uma perturbação na vazão total de alimentação do reator.

Observa-se através da figura 17 que a variação na concentração de para-xileno após as perturbações para maior e menor na vazão total não é muito acentuada e apresenta

boa simetria entre as curvas demonstrando que existe um comportamento linear entre essas variáveis. A elevação da vazão total, que depende da necessidade de produção, provoca redução da concentração de para-xileno na saída do reator devido ao aumento da velocidade espacial dentro do leito catalítico. Para manter a intensidade da reação e a tendência ao equilíbrio é necessário elevar a temperatura da reação.

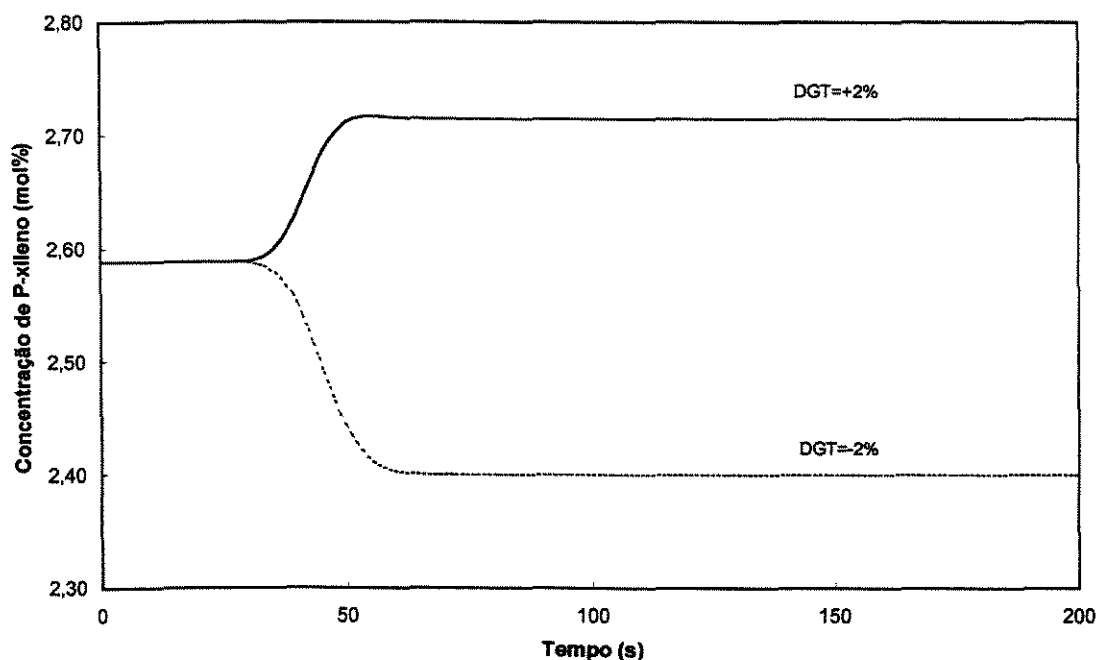


Figura 18. Comportamento da concentração de para-xileno ao ser introduzida uma perturbação na temperatura de entrada do reator.

A variação da concentração de para-xileno para uma perturbação pequena na temperatura de entrada do reator é mais acentuada do que no caso da perturbação na vazão total, e apresenta um tempo de estabilização até que os efeitos do distúrbio sejam sentidos pelo processo. Observa-se através da figura 18, que não há simetria perfeita entre as curvas obtidas indicando que o sistema tem comportamento ligeiramente não-linear em relação a essa variável. Porém, para este estudo, esse comportamento será considerado linear uma vez que a diferença entre os valores das respostas é de 0,06 mol % e a maioria dos processos químicos pode ser bem representada por sistemas lineares.

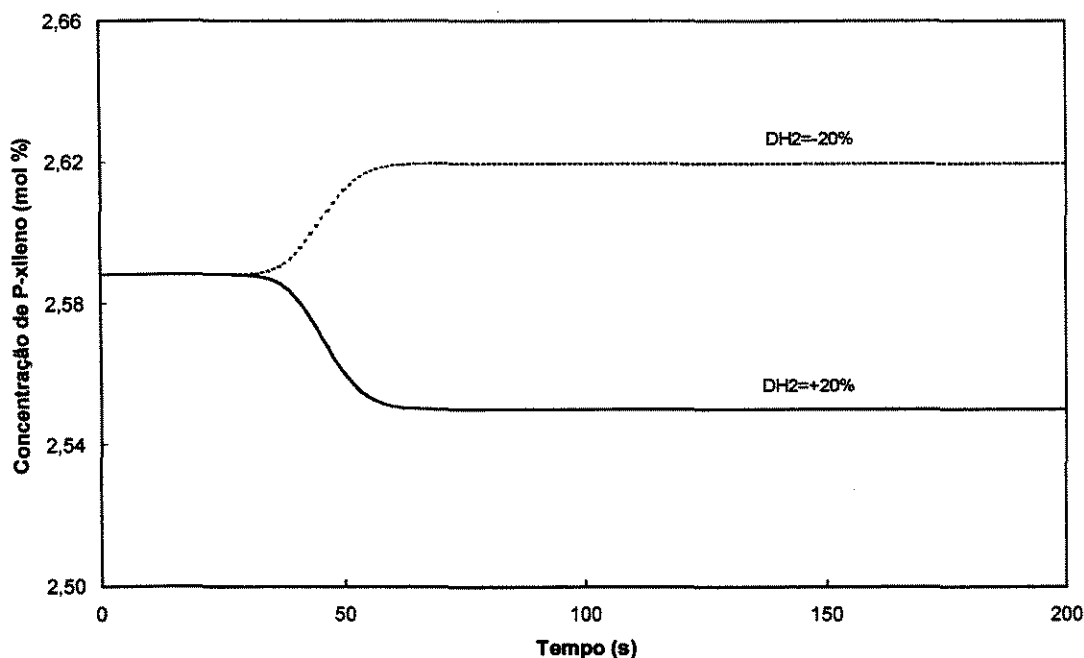


Figura 19. Comportamento da concentração de para-xileno após ser introduzida uma perturbação na pressão parcial de hidrogênio na entrada do reator.

A variação na concentração de para-xileno para perturbação na pressão parcial de hidrogênio, figura 19, a exemplo do que acontece com perturbação na vazão total, não é muito acentuada e apresenta comportamento linear. Como observado pelos pesquisadores (Bathia e colaboradores, 1989), a elevação da pressão parcial do hidrogênio provoca a redução da concentração de para-xileno na saída do reator devida a perda de anéis aromáticos entre outras causas.

A próxima etapa da simulação foi elaborada após introdução das equações que representam a desativação do catalisador no modelo do processo. A desativação do catalisador usado no processo em estudo tem como causa principal a formação de depósitos de carbono conhecidos como coque, que são retidos nos poros e na superfície do mesmo. Esse processo depende das características do catalisador, da temperatura de reação e da natureza dos reagentes. A equação utilizada para representar a cinética da desativação é uma função exponencial empírica proposta e testada por vários pesquisadores como por exemplo Froment e Bischoff (1962). A equação da taxa de formação de coque utilizada é função das concentrações dos reagentes. A constante da taxa de formação de coque e o

parâmetro de desativação foram determinados através de simulação e os resultados que melhor representam o processo são comentados a seguir.

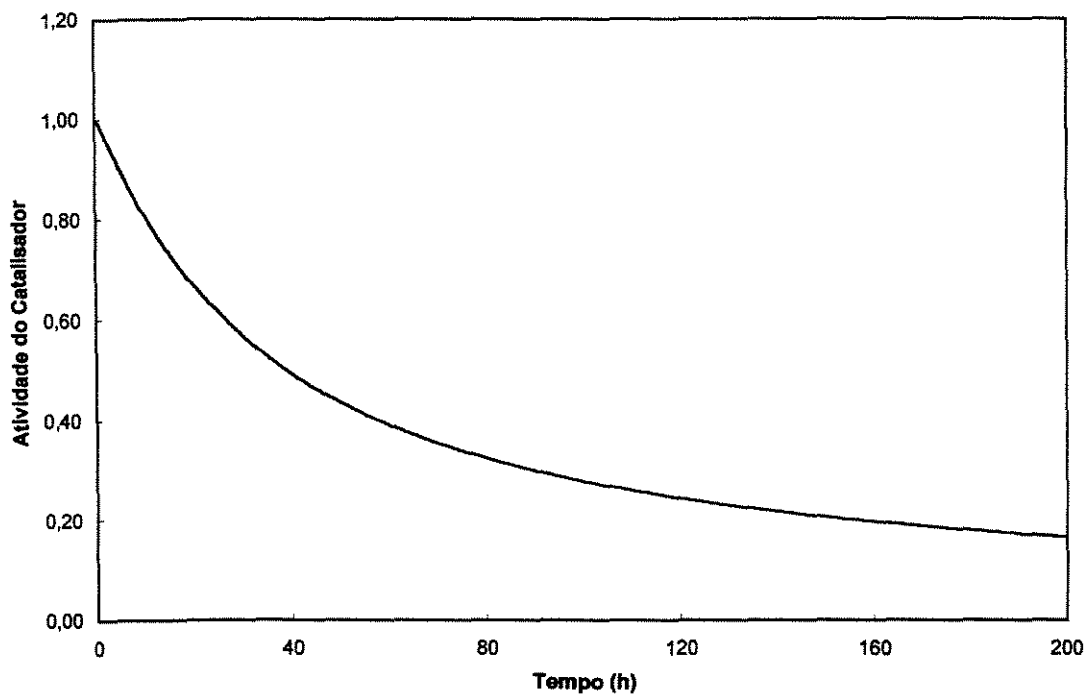


Figura 20. Variação da atividade do catalisador com o tempo

A redução da atividade do catalisador está representada na figura 20 onde observa-se que a desativação ocorre com mais intensidade no início da operação, chegando após certo tempo a uma condição de operação antieconômica que é considerada como final do ciclo de operação desse catalisador. Esse tempo é a vida útil do catalisador após o qual a carga utilizada deve ser regenerada ou descartada. Num processo industrial a vida útil do catalisador varia de um a dois anos porém, para simulação do efeito da desativação do catalisador no processo foi considerada como sendo 200 horas.

A variação da atividade do catalisador com o comprimento do leito catalítico está mostrada na figura 21. Os perfis de atividade obtidos ao longo do tempo mostram que no início da operação ($t = 10h$) a atividade é menor na entrada do leito catalítico devido a maior formação e depósito de compostos de carbono nessa região. Com o tempo de operação esses compostos vão se depositando ao longo do leito até que todo o catalisador apresente o mesmo nível de ativação. Ao mesmo tempo esse nível de ativação está sendo reduzido em todo o leito devido ao acúmulo dos compostos de carbono formados.

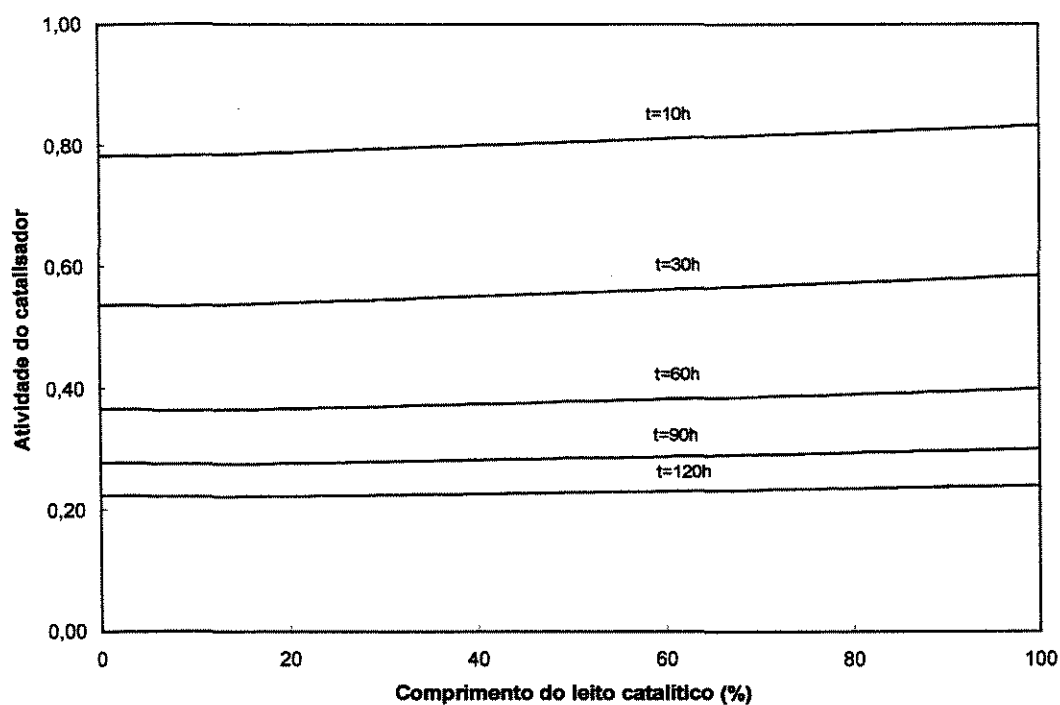


Figura 21. Variação da atividade do catalisador com o comprimento do leito catalítico.

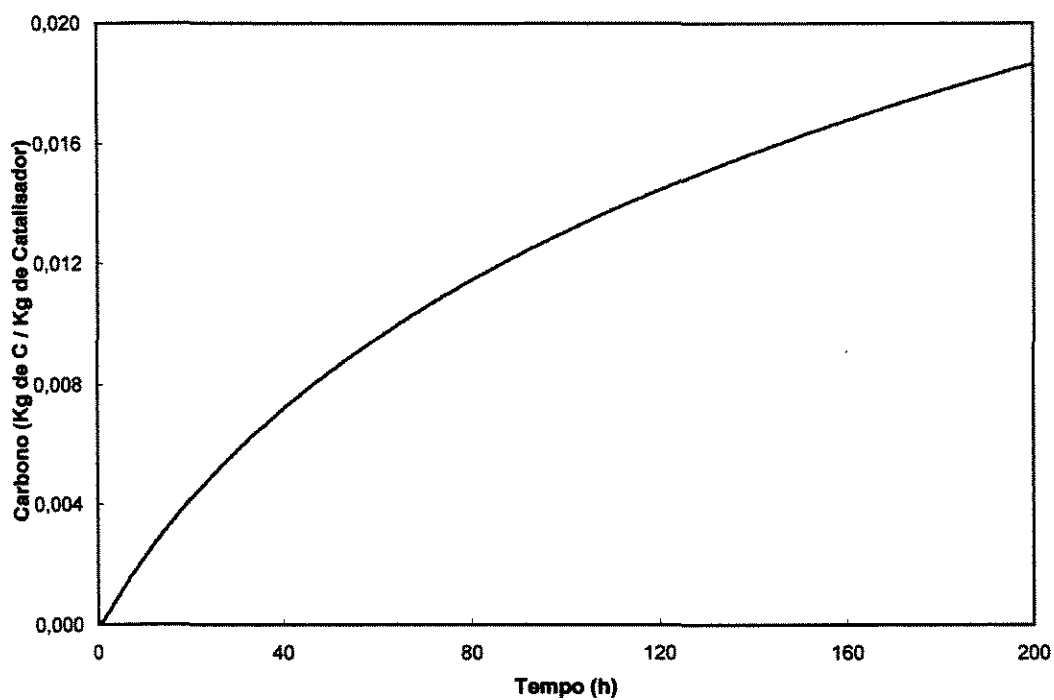


Figura 22. Carbono depositado em função do tempo

Na figura 22 encontra-se representada a quantidade de compostos de carbono formada e depositada no catalisador em função do tempo de operação. Essa é uma quantidade média pois existe variação ao longo do leito catalítico como ficou evidenciado na figura 23.

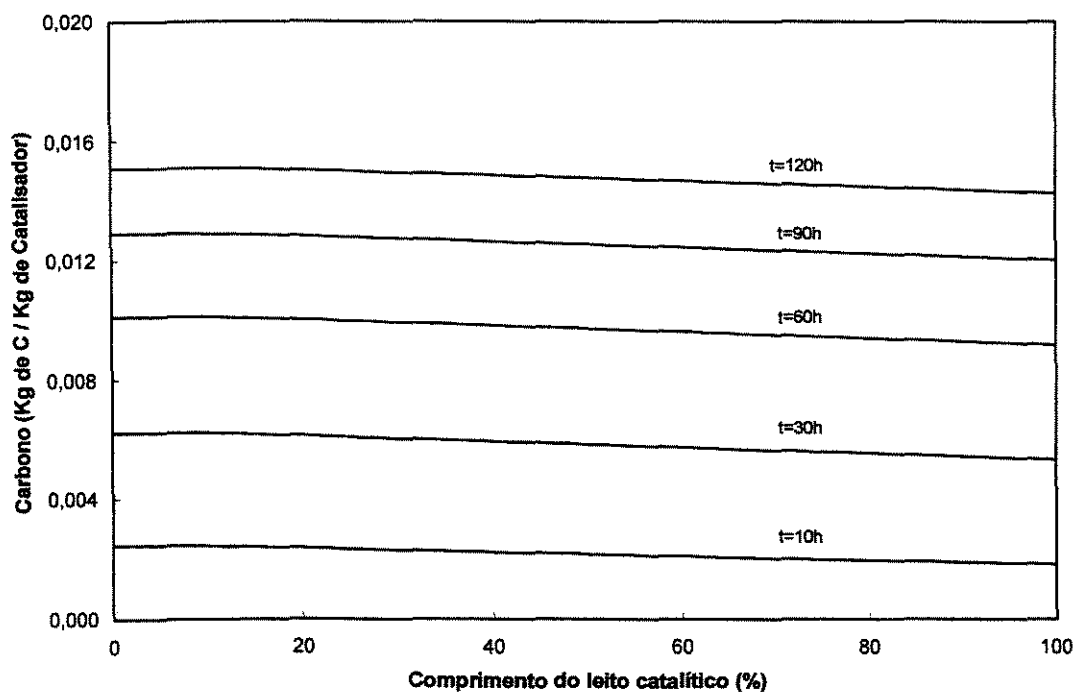


Figura 23. Compostos de Carbono depositados no leito catalítico.

A figura 23 mostra a quantidade de compostos de carbono depositada ao longo do comprimento do leito catalítico e sua variação com o tempo de operação. Pode-se observar que esses compostos formam-se e acumulam-se em maior quantidade na entrada do leito.

A partir do momento em que a desativação do catalisador foi incorporada ao modelo do reator pode-se observar melhor a influência da dinâmica do sistema na concentração dos produtos. Na figura 24 encontra-se representada a variação da concentração de para-xileno com o tempo de operação para alguns valores de temperatura de entrada do reator. Valores de temperatura mais elevados favorecem o aumento da velocidade da reação resultando em maiores valores de concentração de para-xileno na saída do reator, porém aumenta também a formação de coque. O comportamento decrescente está de acordo com o encontrado na prática onde a desativação do catalisador está ocorrendo.

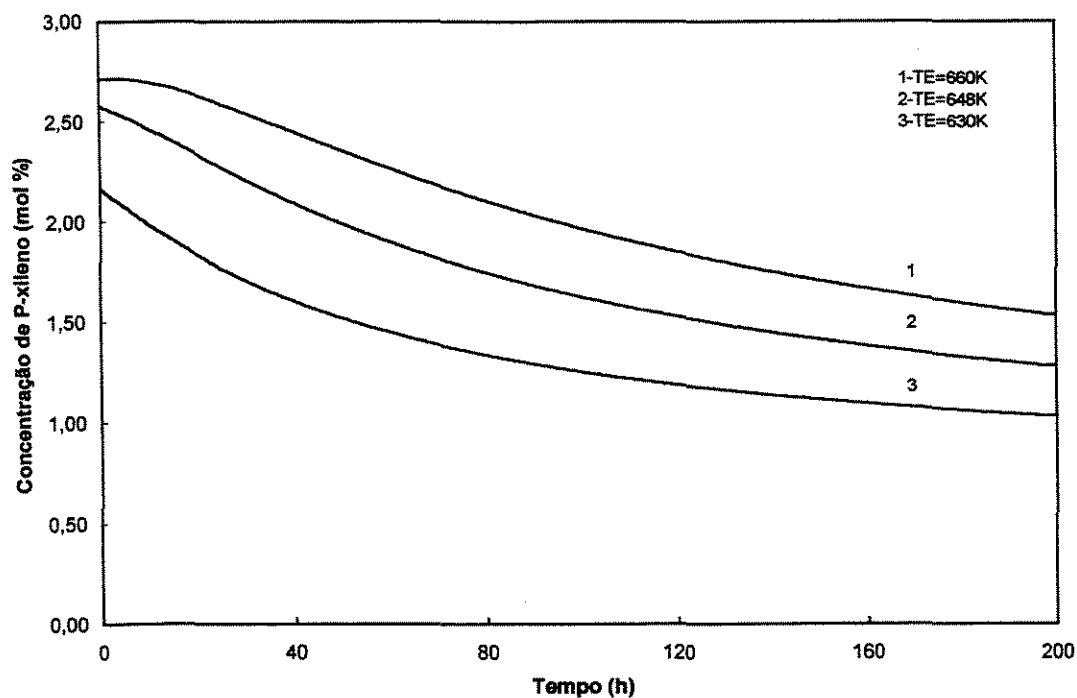


Figura 24. Variação da concentração de para-xileno com o tempo.

Concorda ainda com testes encontrados na literatura, que evidenciam a redução da conversão dos reagentes com o tempo (Corella e Monzon, 1988).

3.3. RESULTADOS DA SIMULAÇÃO DO FORNO

Para a simulação do forno foi elaborado um programa em linguagem FORTRAN, seguindo as mesmas etapas do programa do reator. A diferença maior é que no forno tem uma única equação diferencial ordinária para ser resolvida e uma única variável independente que é o tempo de operação. Foi utilizado o método de Runge-Kutta-Gill para a solução da equação.

Nessa simulação são adotadas as seguintes premissas simplificadoras:

1. O modelo unidimensional é válido.
2. Operação com fluxo empistonado.
3. Operação em regime transiente.

4. Dispersão de calor e de massa desprezíveis.
5. A corrente gasosa tem densidade e capacidade calorífica médias constantes.

Para a simulação do modelo dinâmico desenvolvido foram utilizados dados de literatura, informações de processo industrial e os valores da temperatura do fluido de processo na entrada do reator, que deve ser igual a temperatura desse fluido na saída do forno, obtidos na simulação do reator. Os dados utilizados se encontram no Anexo 2.

A simulação do forno tem como objetivo conhecer a dinâmica desse processo para que se possa propor uma estratégia de controle que atenda às necessidades do processo de reação catalítica que se deseja controlar. Perturbações nas variáveis principais após a estabilização do processo são introduzidas para a análise do comportamento do sistema. A estabilização ocorre com a temperatura igual a 648K, que é a temperatura de alimentação do reator, cerca de 500 s após ter iniciado a operação do forno.

As perturbações introduzidas na variável temperatura de entrada do forno, foram de + 10% e - 10%, e os resultados obtidos estão mostrados na figura 25.

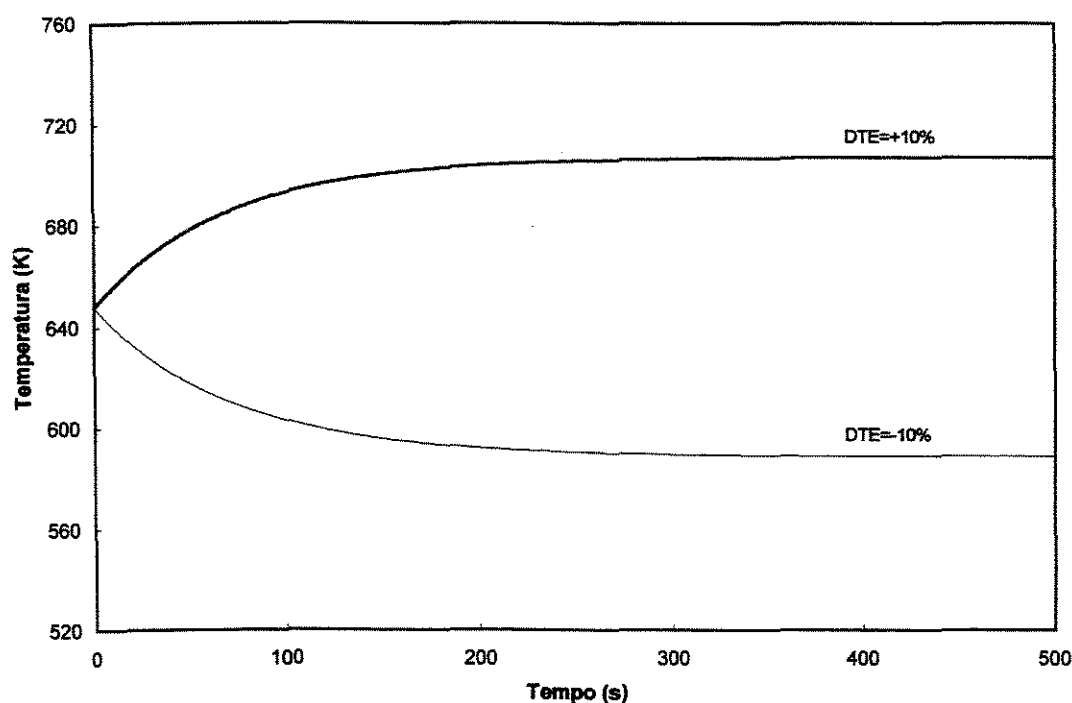


Figura 25. Comportamento da temperatura de saída do forno após ter sido introduzido um distúrbio na temperatura de entrada.

Pode-se observar que as curvas são perfeitamente simétricas ($\Delta T = 59\text{K}$), o que indica que o sistema apresenta um comportamento linear em relação à essa variável.

Observa-se também que a temperatura de entrada é a variável que provoca a maior alteração na temperatura de saída do forno que é a variável de interesse neste estudo.

As perturbações introduzidas nas variáveis, vazão de reagentes e vazão de combustível, foram de +20% e -20%.

A resposta a variação na vazão de reagentes é não linear conforme mostra a figura 26. Enquanto o sistema tem comportamento linear em relação a variações na vazão de combustível ($\Delta T = 11\text{K}$), figura 27.

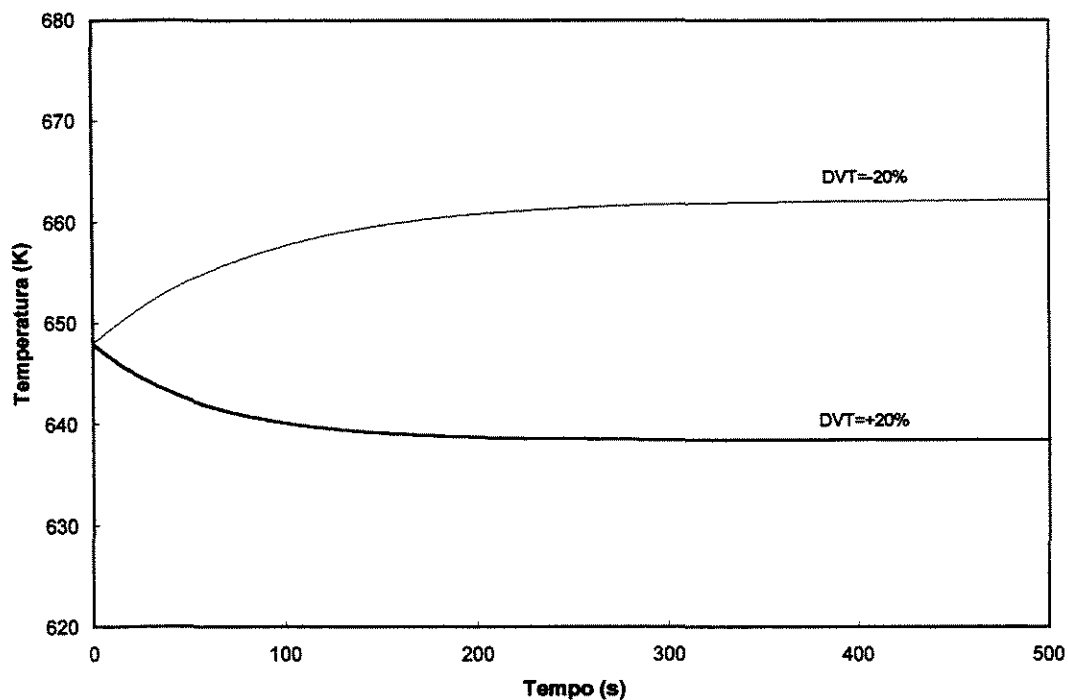


Figura 26. Comportamento da temperatura de saída do forno após ter sido introduzido um distúrbio na vazão total do fluido de processo.

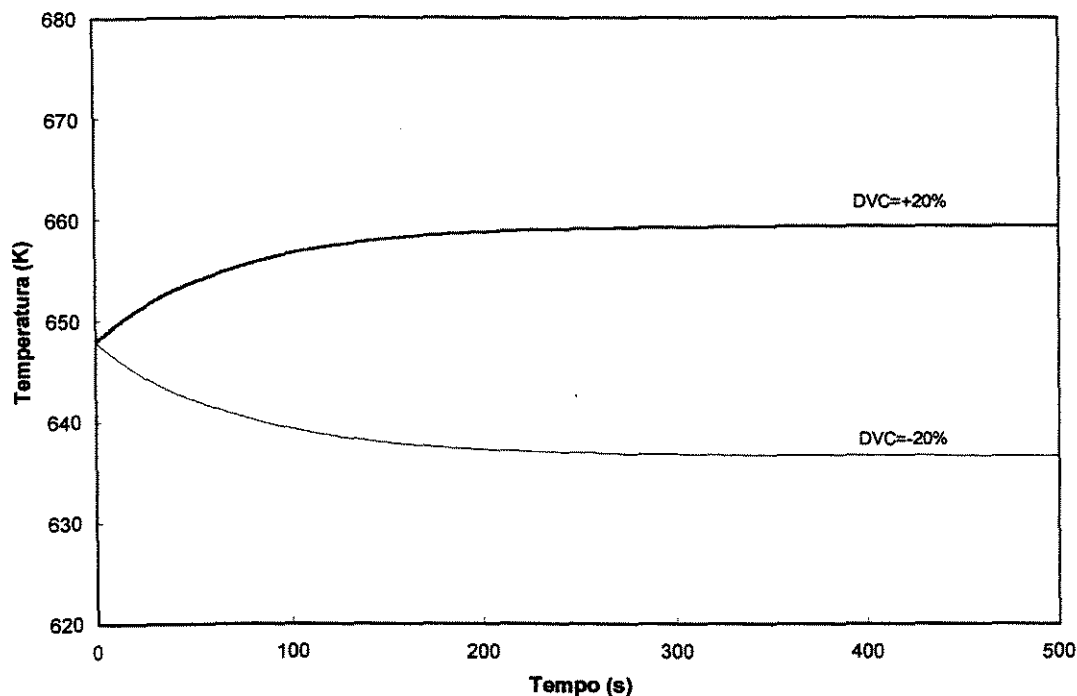


Figura 27. Comportamento da temperatura de saída do forno após ter sido introduzido um distúrbio na vazão total de combustível.

3.4. COMENTÁRIOS

Os resultados apresentados mostram que o modelo matemático desenvolvido representa de forma adequada o comportamento dinâmico do reator e permite a avaliação preliminar qualitativa do comportamento das variáveis do processo quando ocorrem modificações nos valores do estado estacionário. Esses resultados indicam também que a variável temperatura de entrada do reator é muito importante nesse processo e tem função determinante no controle da concentração de saída do reator.

Pode-se observar que a resposta do sistema a essas variações é bastante rápida pois, o estado estacionário é restabelecido em pouco tempo. Observa-se também que a sensibilidade do sistema para as perturbações na temperatura de entrada do reator é maior do que para variações na vazão total, e na pressão parcial de hidrogênio. Os resultados

obtidos com desativação do catalisador descrevem o sistema de forma adequada conforme informações disponíveis na literatura especializada.

Os resultados obtidos na simulação do forno também estão de acordo com o esperado e permitem a elaboração de uma proposta para um sistema de controle.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS DA IMPLEMENTAÇÃO DA ESTRATÉGIA DE CONTROLE

4.1. INTRODUÇÃO

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos após a implementação da estratégia sugerida, que consta de uma estrutura de controle em cascata (Figura 28) onde a malha primária controla a concentração de para-xileno na saída do reator através manipulação da temperatura de entrada. A malha secundária utiliza esses valores de temperatura como trajetória de referência ('set point') e controla a temperatura de saída através da manipulação da vazão de combustível alimentada ao forno. Os resultados foram usados como referência na seleção do tipo de controlador e das condições operacionais que melhor atendam as necessidades do processo.

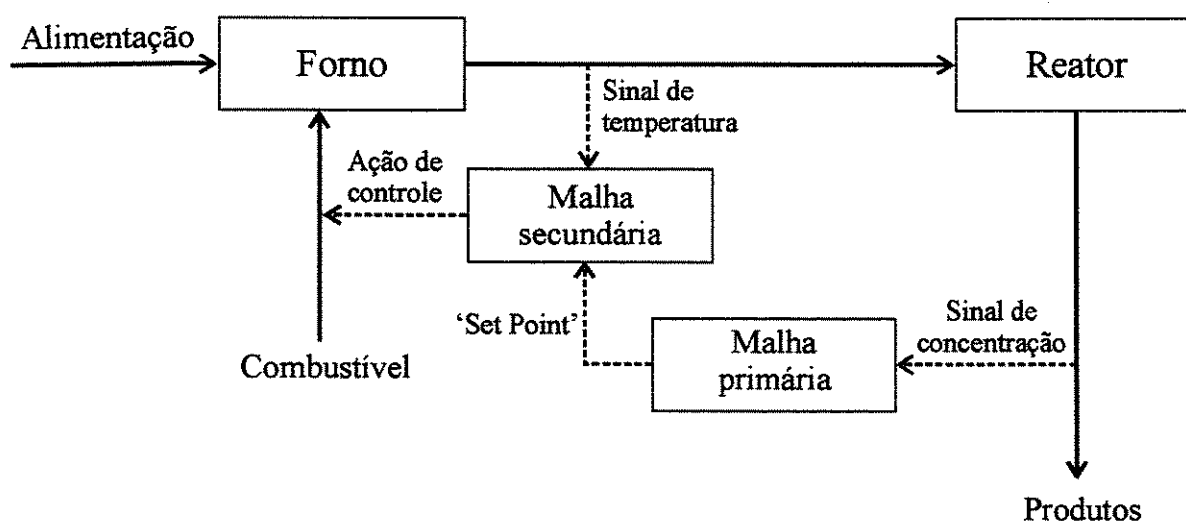


Figura 28. Controle em cascata

O sistema de controle ideal para aplicação ao reator catalítico em estudo, deve ser capaz de representar a natureza do processo da maneira mais próxima do real. Isso é obtido considerando um modelo do processo adequado à representação do comportamento dinâmico deste e um controlador que tenha a habilidade de compensar os efeitos como exemplo dos atrasos de transporte do processo e das medições, e da natureza dinâmica do processo.

O controlador IMC foi escolhido devido a possuir essa habilidade além de ser robusto frente aos erros do modelo do processo.

A análise apresentada neste estudo considera que o reator, submetido à desativação do catalisador, é um sistema com uma única entrada e única saída (SISO) e foi desenvolvida a partir do cálculo do controlador IMC com estrutura básica que é a forma mais simples de aplicação da teoria. Em seguida, foi calculado o controlador IMC com o Preditor Analítico Generalizado (GAP) que faz a predição das saídas futuras até um tempo igual ao atraso de transporte do processo e usa essa predição na estimativa da ação de controle. Por fim foi calculado o IMC preditivo baseado na técnica de controle preditivo com modelo que permite fazer a predição das saídas futuras em um tempo maior, limitado apenas pelo horizonte do processo e pelo esforço computacional. Também foi calculado o controlador PID convencional para comparação dos resultados obtidos na malha primária.

Para a malha secundária aplicada ao forno de aquecimento da corrente de entrada do reator, foram implementados os controladores PID e IMC preditivo. Nesse sistema também foi considerada única entrada e única saída (SISO).

Os programas desenvolvidos em linguagem FORTRAN têm como base o algoritmo apresentado no capítulo 2 modificado para introdução da subrotina de controle. As listagens desses programas se encontram no Anexo 1, e das subrotinas no Anexo 4.

4.2. RESULTADOS OBTIDOS COM A ESTRUTURA BÁSICA DO CONTROLADOR IMC.

De acordo com a teoria do controlador IMC o processo é representado por um modelo interno que calcula a variável controlada que será comparada ao valor obtido pelo modelo paramétrico. Como modelo interno do processo foi usada uma função de transferência de primeira ordem com atraso de transporte obtida através do ajuste dos dados da resposta à variação em degrau, provocada na temperatura de entrada do reator, apresentada na figura 18 no capítulo 3.

Inicialmente foi considerada a aplicação do controlador IMC com sua estrutura básica que segundo a teoria, mostrada no capítulo 1, utiliza um filtro que mantém a

robustez do controlador na presença de erros do modelo. A constante do filtro α_f é o parâmetro de sintonia desse controlador.

O controlador foi calculado usando um filtro de primeira ordem e função 'hold' de ordem zero. Para efeito do desenvolvimento do cálculo, a variável controlada foi chamada de y , a ação de controle de M e o valor de referência de SP e as equações resultantes são apresentadas a seguir:

$$\text{para } N=3 \quad y_n = \alpha y_{n-1} + (1 - \alpha)K_p M_{n-4} \quad (96)$$

$$M_n = \alpha_f \cdot M_{n-1} + (E_n - \alpha E_{n-1}) \frac{(1 - \alpha_f)}{(1 - \alpha)K_p} \quad (97)$$

$$\text{onde} \quad \alpha = e^{-\Delta t / \tau}$$

$$E_n = SP_n - (y_n - y'_n)$$

$$N = \theta_D / \Delta t$$

$$K_p = \text{ganho do processo}$$

A seguir são apresentados os resultados obtidos com a aplicação do controlador IMC com estrutura básica ao reator de isomerização de xilenos. As escalas das ordenadas foram bastante ampliadas para melhor observação.

A figura 29 mostra a variação da concentração de para-xileno com o tempo para o sistema dinâmico de reação catalítica considerando a desativação do catalisador, para diferentes tempos de amostragem ($DT = \Delta t$). O estudo sobre o tempo de amostragem foi elaborado para um valor médio da constante do filtro ($\alpha_f = 0,5$). O período de amostragem ótimo para esse processo de acordo com os critérios sugeridos pela literatura (Seborg, 1989, e Deshpande, 1988) está na faixa de 9 a 24 min. Dos resultados obtidos na simulação do processo foi escolhido como melhor tempo de amostragem $\Delta t = 15$ min. Um tempo maior provoca maior oscilação no início da operação controlada e aumenta o afastamento do valor controlado em relação ao desejado tornando o controle impróprio para esse sistema.

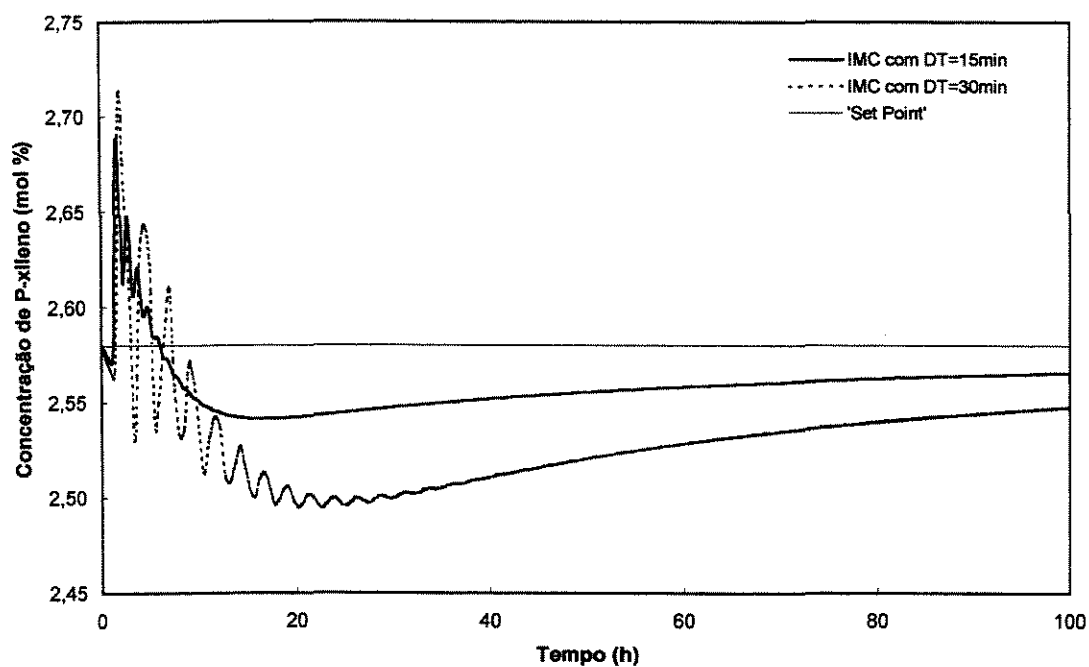


Figura. 29. Comportamento da variável controlada para diferentes tempos de amostragem.

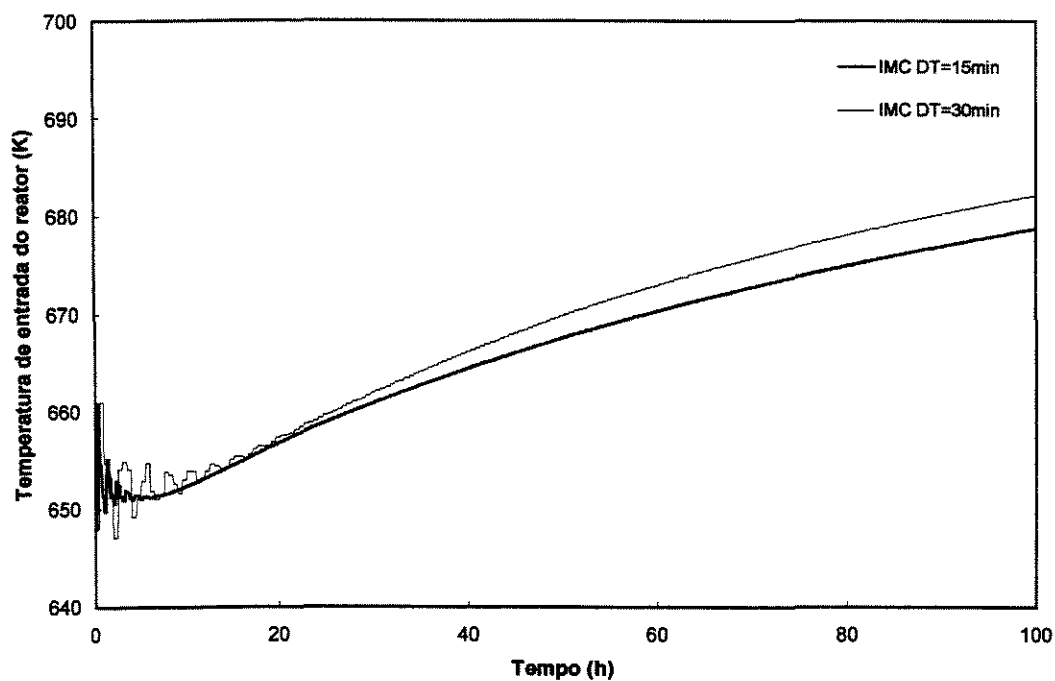


Figura 30. Comportamento da variável manipulada.

No cálculo da variável manipulada, temperatura de entrada do reator, pode-se observar, na figura 30, uma oscilação não desejada, no início da operação do controlador, de aproximadamente 14K, e a oscilação aumenta quando o intervalo de amostragem é maior. O constante aumento da temperatura de entrada do reator é necessário para compensar a desativação do catalisador.

A figura 31 apresenta o comportamento da variável controlada para diferentes valores do parâmetro de sintonia do controlador que é a constante do filtro. Para valores da constante do filtro próximos de zero ($\alpha_f = 0,2$), a resposta dinâmica é melhor e mais rápida porém, o sistema fica mais sensível a erros do modelo e oscila. Para valores da constante do filtro próximos de um ($\alpha_f = 0,8$), o controlador fica mais robusto porém, a resposta fica muito lenta.

Estas observações estão coerentes com a teoria de desenvolvimento desse controlador proposta por Morari e colaboradores citados por Seborg (1989).

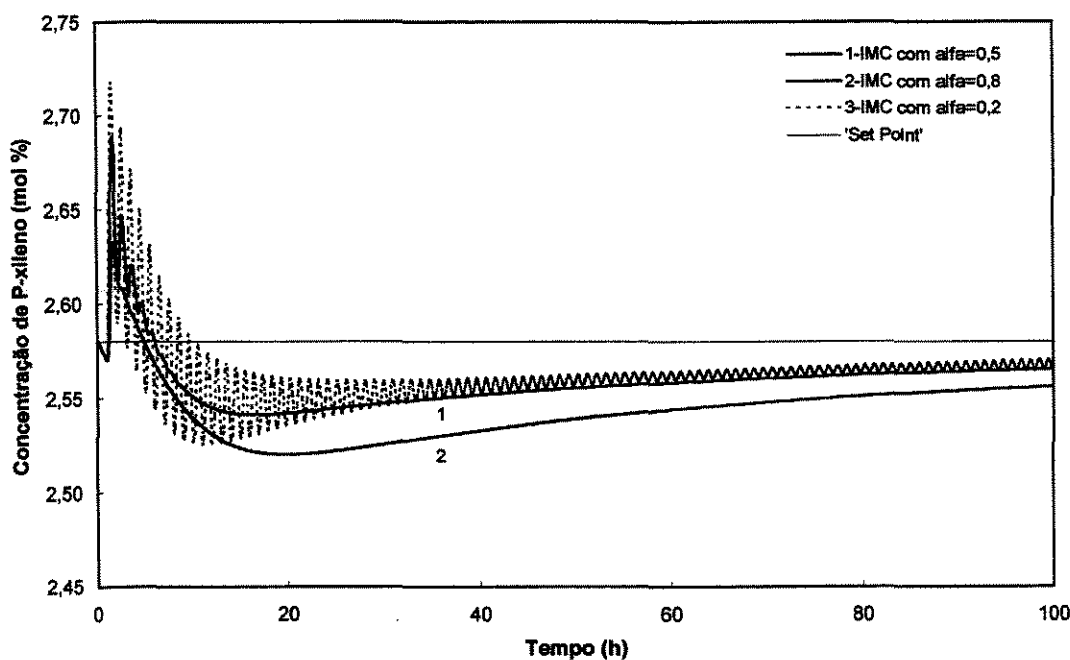


Figura 31. Comportamento da variável controlada para diferentes valores da constante do filtro.

4.3. RESULTADOS OBTIDOS COM O CONTROLADOR IMC COM PREDITOR ANALÍTICO GENERALIZADO

Objetivando alcançar resposta mais rápida e eficaz foi utilizado o controlador IMC combinado com o Preditor Analítico Generalizado (GAP), que é usado para prever o efeito dos distúrbios no sinal do erro em N passos no futuro. Esse controlador pertence a uma classe especial de controladores digitais e apresenta bom desempenho tanto para variações na carga quanto no valor de referência. O mesmo é obtido de uma expansão do diagrama de blocos do IMC onde é incluído o bloco A^* usado no sentido preditivo, num horizonte limitado pelo atraso de transporte. O modelo interno do processo é o mesmo considerado anteriormente. Esse controlador tem como parâmetros de ajuste a constante do filtro usado para manter a robustez do controlador na presença de erros do modelo (α_f), e a constante do filtro da estimativa da carga (β). O preditor GAP faz a predição perfeita e sem erros no modelo ($\tau_L=1,0$) e apresenta melhores resultados com menor ação de controle (Seborg, 1989).

A seguir são apresentadas as equações obtidas no cálculo do controlador utilizando as informações sobre essa técnica apresentadas no capítulo 1 e para $N=3$:

$$\tilde{y}_n = a\tilde{y}_{n-1} + (1-a)K_p M_{n-4} \quad (98)$$

$$M_n = \alpha_f M_{n-1} + (E_n - aE_{n-1}) \frac{(1-\alpha_f)}{(1-a)K_p} \quad (99)$$

onde, $E_n = SP_n - \hat{d}_n^N$

$$\hat{d}_n^N = \beta \hat{d}_{n-1}^N + (\bar{a}^N + \bar{c}) \tilde{d}_n - (\bar{a}^N \beta + \bar{a}\bar{c}) \tilde{d}_{n-1}$$

$$\tilde{d}_n = y_n - \tilde{y}_n \quad \bar{a} = e^{-\Delta t/\tau_L} \quad \bar{c} = \frac{1-\bar{a}^N}{1-\bar{a}}(1-\beta)$$

A seguir são apresentados os resultados obtidos com a aplicação do controlador IMC com GAP ao reator de isomerização de xilenos.

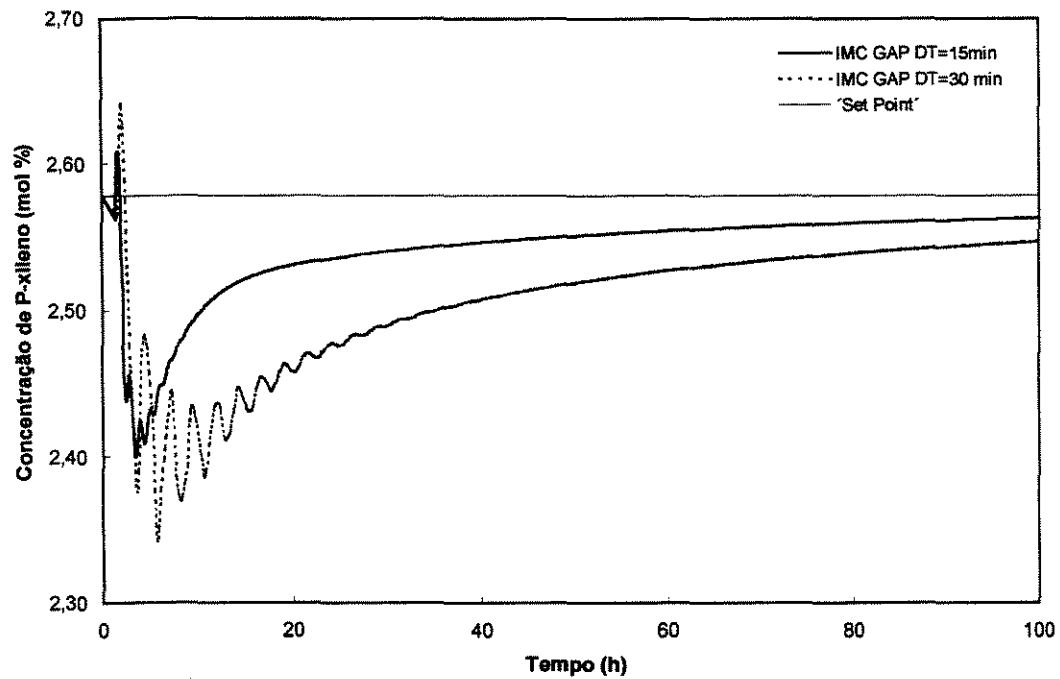


Figura 32. Comportamento da variável controlada para diferentes tempos de amostragem.

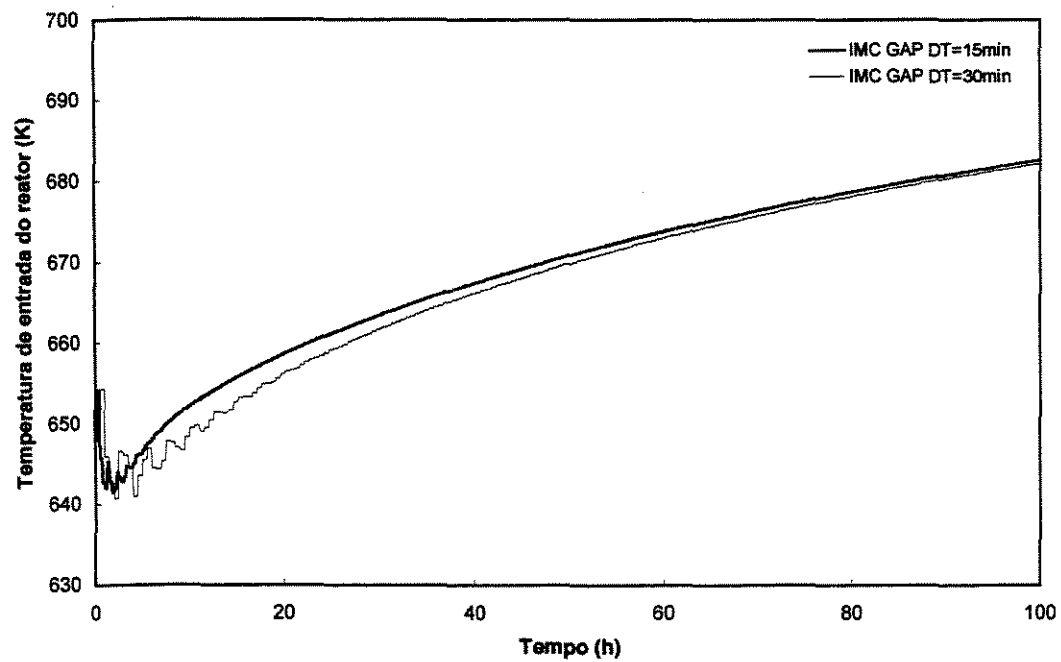


Figura 33. Comportamento da variável manipulada

Na figura 32 observa-se comportamento coerente com o obtido com o controlador IMC com a estrutura básica onde o tempo de amostragem de quinze minutos mostrou-se mais adequado. Esse estudo foi realizado para $\alpha_f = 0,5$ e $\beta = 0,8$.

A temperatura de entrada do reator sofre variação ainda elevada quando do início da operação do controlador como mostra a figura 33, porém, em intensidade menor do que no caso do controlador IMC com a estrutura básica. Observa-se também menor oscilação em relação a aquele e a convergência dos valores de temperatura indicando pouca influência do valor do intervalo de amostragem com o tempo de operação. O comportamento crescente da temperatura está de acordo com a desativação do catalisador.

Foram efetuadas várias simulações para análise do efeito da variação das constantes dos filtros do controlador, α_f , e da carga, β , combinando os valores das duas constantes. A figura 34 apresenta resultados através dos quais verifica-se que o aumento da constante do filtro do controlador, α_f , faz com que a curva torne-se mais suave reduzindo a oscilação no início da atuação do controlador porém, aumenta o afastamento entre a resposta obtida e a desejada.

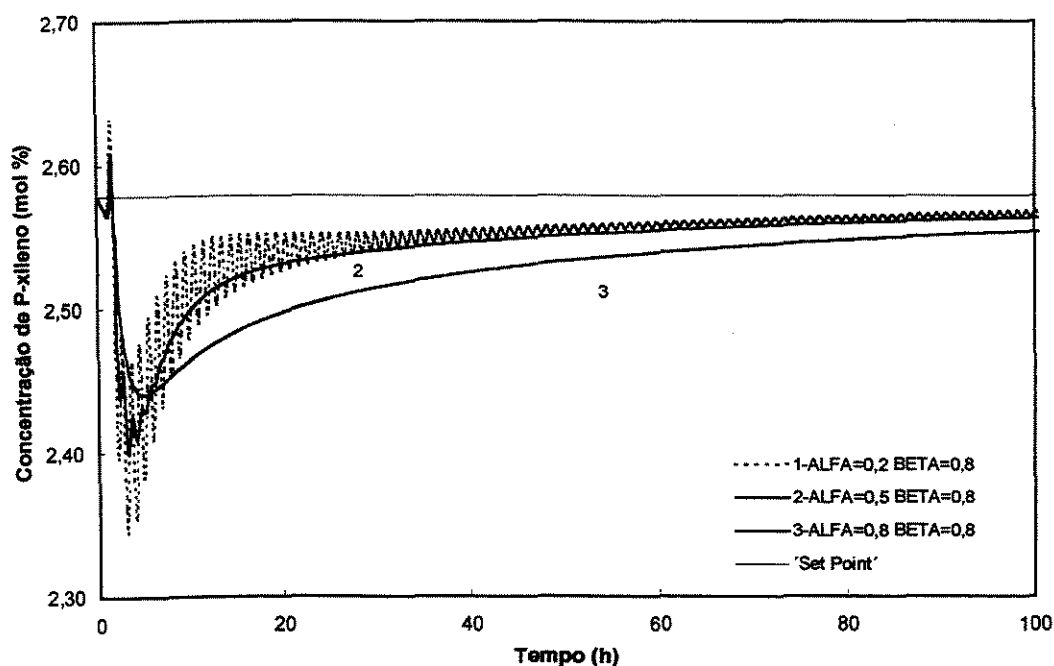


Figura 34. Comportamento da variável controlada para diferentes valores dos parâmetros de sintonia.

O mesmo comportamento foi observado em relação a constante do filtro do controlador IMC com estrutura básica.

Os valores escolhidos como mais adequados para as análises seguintes foram $\alpha_f = 0,5$ e $\beta = 0,8$. A resposta ainda é lenta e a variação maior que acontece no início da operação controlada é para menor em relação ao valor de referência porém, o afastamento entre a resposta obtida e a desejada converge para a mesma faixa de valores do caso anterior.

Após cinquenta horas de operação controlada foi simulado um distúrbio na vazão total alimentada ao reator com elevação de 10% no valor normal de operação. Através da figura 35 verifica-se uma queda na concentração de para-xileno provocada pelo aumento da velocidade espacial no leito catalítico, e a recuperação do valor dessa variável para os níveis desejados.

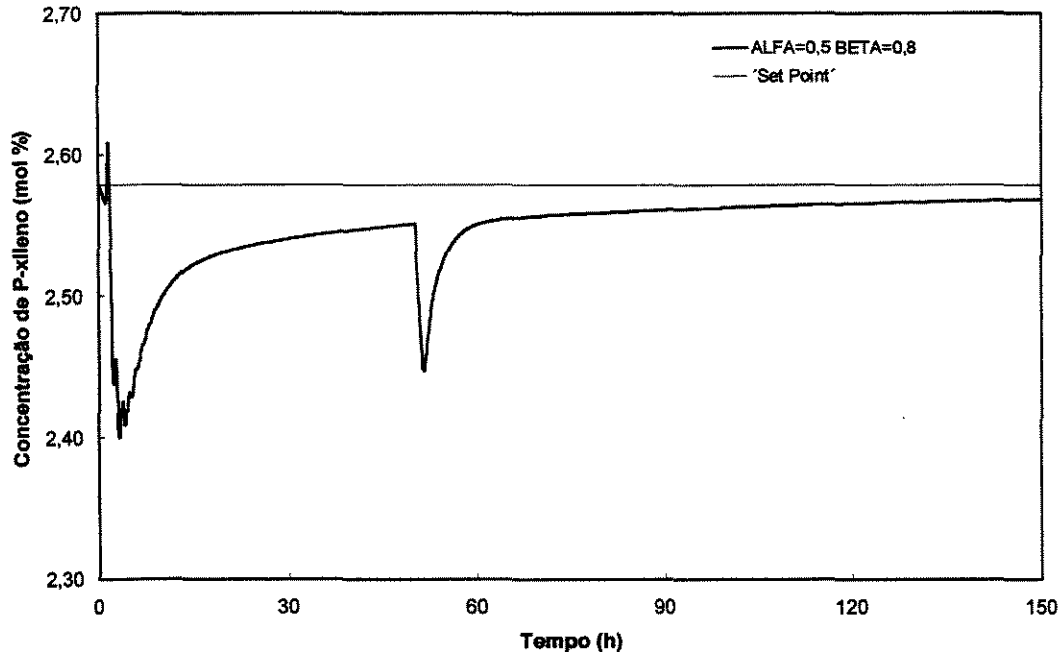


Figura 35. Comportamento da variável controlada com distúrbio na entrada do reator.

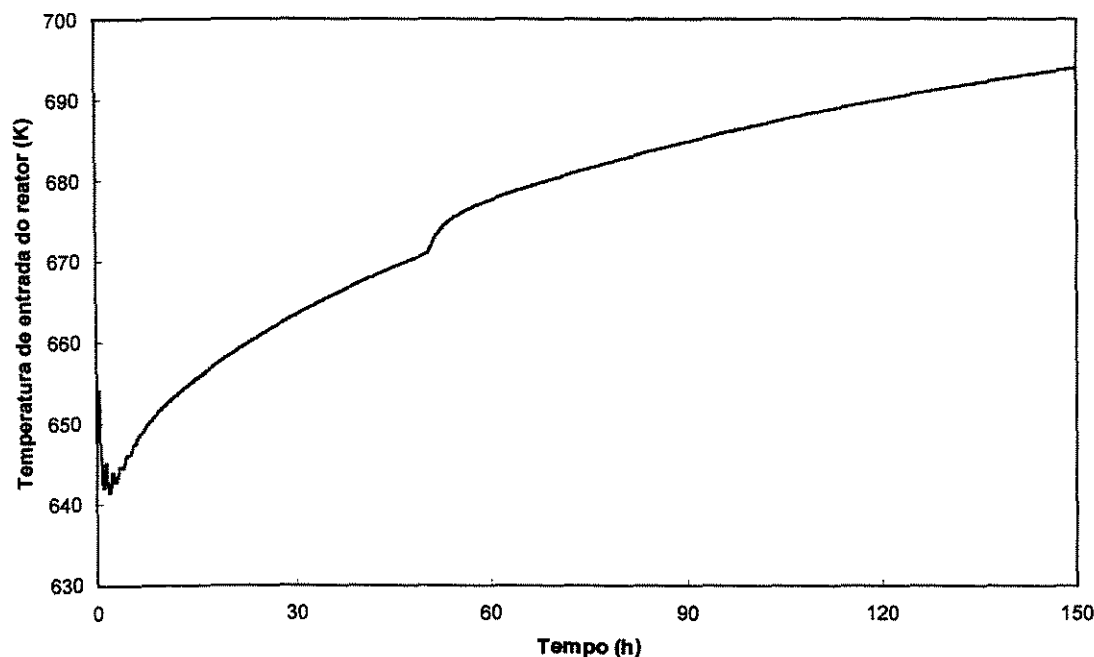


Figura 36. Comportamento da variável manipulada

Na figura 36 encontra-se representada a variação da temperatura de entrada do reator, para o caso anterior com distúrbio na vazão total, apresentando a elevação provocada pelo controlador para compensar a queda da concentração do para-xileno na saída do reator.

Esses resultados evidenciam o fato do controlador absorver, além das variações provocadas pela própria dinâmica do sistema, outras perturbações como, por exemplo, na vazão total de carga.

4.4. RESULTADOS OBTIDOS COM O CONTROLADOR IMC PREDITIVO

No cálculo do controlador IMC preditivo foi utilizado como modelo interno do processo o modelo de convolução discreto no qual, os coeficientes representam a resposta dinâmica do sistema ao impulso. Os coeficientes do modelo de convolução são obtidos a

partir dos coeficientes da resposta a uma perturbação em degrau unitário provocada na variável manipulada.

Para esse estudo foi adotada uma variação em degrau na temperatura de entrada do reator e observado o comportamento da variável controlada com o tempo de operação. Para evitar erros de truncamento na predição o número de pontos onde se determina os coeficientes no modelo de convolução deve ser grande o suficiente para o processo se aproximar de um estado estacionário, quando os valores desses coeficientes se aproximam de zero. Nesse estudo foram adotados, após simulação do processo, 70 pontos, número que corresponde ao horizonte do modelo. No Anexo 3 estão as listagens dos programas desenvolvidos em linguagem FORTRAN para o cálculo do modelo de convolução e os coeficientes utilizados no cálculo do controlador.

A teoria do controlador preditivo com modelo considera uma trajetória desejada num horizonte de P intervalos de amostragem no futuro que deve ser seguida pela saída predita. Para isso é calculada uma seqüência de ações de controle que levam a predição do modelo o mais próximo possível do valor de referência desejado. Porém, se o modelo do processo adotado contiver erros, a resposta pode desviar muito da trajetória desejada. Para evitar esse problema é implementada apenas a primeira ação de controle calculada. No próximo instante de amostragem o ponto de partida é a saída real medida e nova seqüência de ações de controle é calculada.

Em cada intervalo de amostragem é calculada a seqüência que minimiza o índice de desempenho do controlador:

$$J = \sum_{i=1}^P \left\{ \gamma_i^2 [Y_{d(k+\tau+i)} - Y_{(k+\tau+i)}]^2 + \beta_i^2 [m_{(k+i-1)}]^2 \right\} \quad (100)$$

$$i = 1, 2, \dots, P$$

sujeita a:

$$Y_{(k+\tau+i)} = Y_{M(k+\tau+i)} + d_{(k+\tau+i)}$$

$$m_{(k+M)} = m_{(k+M+1)} = \dots = m_{(k+P-1)}$$

onde :

P = Horizonte de predição ou de otimização.

M = Horizonte de controle

γ_i = Pesos aplicados à variável controlada

β_i = Pesos aplicados à variável manipulada

Y = Variável controlada predita corrigida

Y_d = Trajetória desejada

m = Variável manipulada

d = Desvio do processo

A melhor predição é obtida considerando desvio constante em todos os intervalos de amostragem e igual a:

$$d_{(k)} = Y_{(k)} - Y_{M(k)} \quad (101)$$

e
$$Y_{M(k)} = h_1 m_{(k-1)} + h_2 m_{(k-2)} + \dots + h_N m_{(k-N)} \quad (102)$$

onde,

$Y_{(k)}$ = Valor real medido

$Y_{M(k)}$ = Valor calculado pelo modelo interno do processo

h_i = Coeficientes do modelo de convolução

A lei de controle é obtida definindo o erro como sendo:

$$\varepsilon_{(k+i)} = Y_{d(k+r+i)} - d_{(k+r+i)}, \quad (103)$$

e aplicando o método dos mínimos quadrados à equação do índice de desempenho do controlador.

Desenvolvendo a equação 100 e escrevendo a equação dos erros preditos resultante na forma de matriz (Garcia e Morari, 1982), fica:

$$\begin{bmatrix} \Gamma_P \varepsilon_{P(k+1)} \\ \dots\dots\dots \\ \mathbf{O} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Gamma_P R_P A T_M \\ \dots\dots\dots \\ B_M \end{bmatrix} U_{M(k)} + \begin{bmatrix} \Gamma_P \Omega \\ \dots\dots\dots \\ \mathbf{O} \end{bmatrix} V_{(k-1)} \quad (104)$$

onde,

$$\varepsilon_{P(k+1)} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{(k+1)} \\ \varepsilon_{(k+2)} \\ \vdots \\ \varepsilon_{(k+P)} \end{bmatrix}; \quad U_{M(k)} = \begin{bmatrix} m_{(k)} \\ m_{(k+1)} \\ \vdots \\ m_{(k+N-1)} \end{bmatrix}; \quad V_{(k-1)} = \begin{bmatrix} m_{(k-1)} \\ m_{(k-2)} \\ \vdots \\ m_{(k-N+1)} \end{bmatrix} \quad (105)$$

Considerando a definição das demais matrizes conforme indicado no capítulo 1 que trata da teoria dos controladores, a equação final obtida é:

$$m_{(k)} = b^T (T_M^T \Lambda^T R_P^T \Gamma_P^2 R_P \Lambda T_M + B_M^2)^{-1} T_M^T \Lambda^T R_P^T \Gamma_P^T (\varepsilon_{P(k+1)} - \Gamma_P \Omega V_{(k-1)}) \quad (106)$$

No programa elaborado para o cálculo desse controlador a subrotina tem a estrutura apresentada no diagrama de blocos mostrado na figura 37.

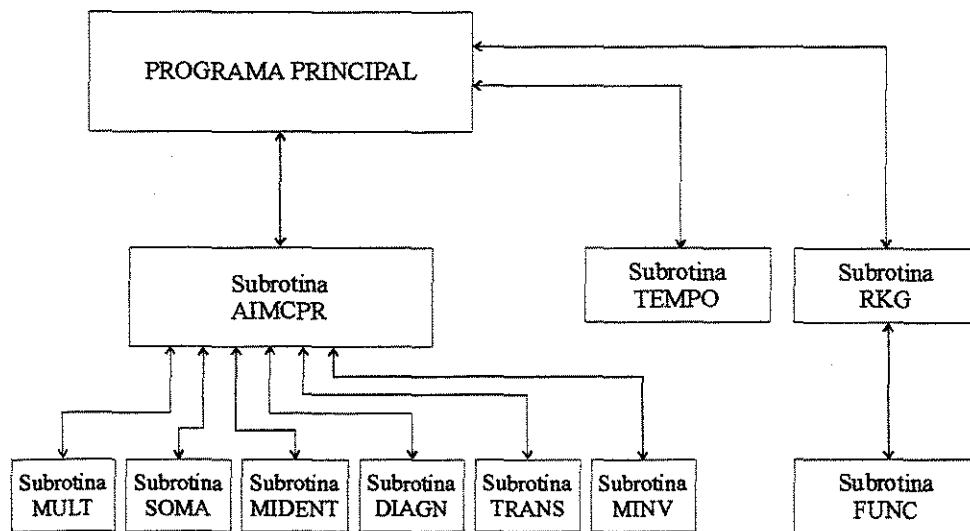


Figura 37. Diagrama de blocos do programa de cálculo do IMC preditivo.

O controlador IMC preditivo tem vários parâmetros ajustáveis, como foi visto no capítulo 1, que apresenta a teoria dos controladores. Os parâmetros são: horizonte do modelo N , horizonte de predição P , horizonte de controle M , pesos aplicados à variável controlada γ_i , pesos aplicados à variável manipulada β_i , a constante do filtro α_f e o tempo de amostragem Δt . O ajuste foi feito através da simulação do processo para vários conjuntos desses parâmetros e os resultados obtidos com a aplicação desse controlador ao reator de isomerização de xilenos são apresentados a seguir.

A figura 38 evidencia que a amostragem muito freqüente ($DT = 10$ min) provoca uma pequena oscilação na variável controlada devido ao maior número de ações de controle implementadas, enquanto valores mais elevados provocam o aumento do afastamento da variável controlada do valor desejado. O melhor tempo de amostragem depende principalmente das características do processo. Para a análise desse controlador, um intervalo de amostragem de 15 min mostrou-se adequado.

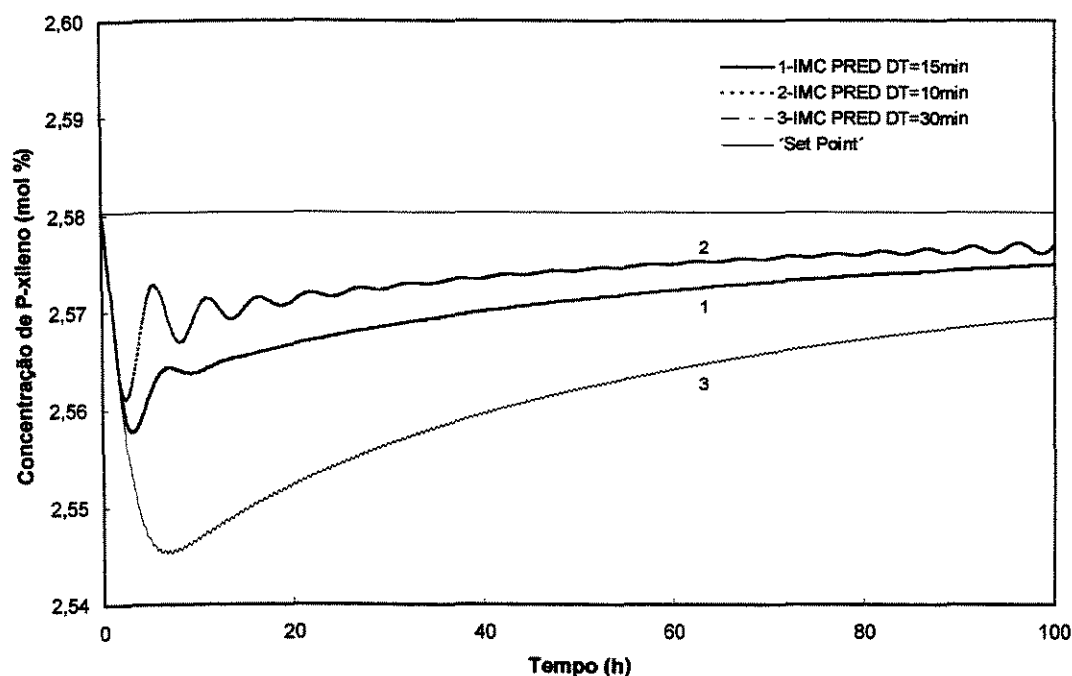


Figura 38. Comportamento da variável controlada para vários tempos de amostragem.

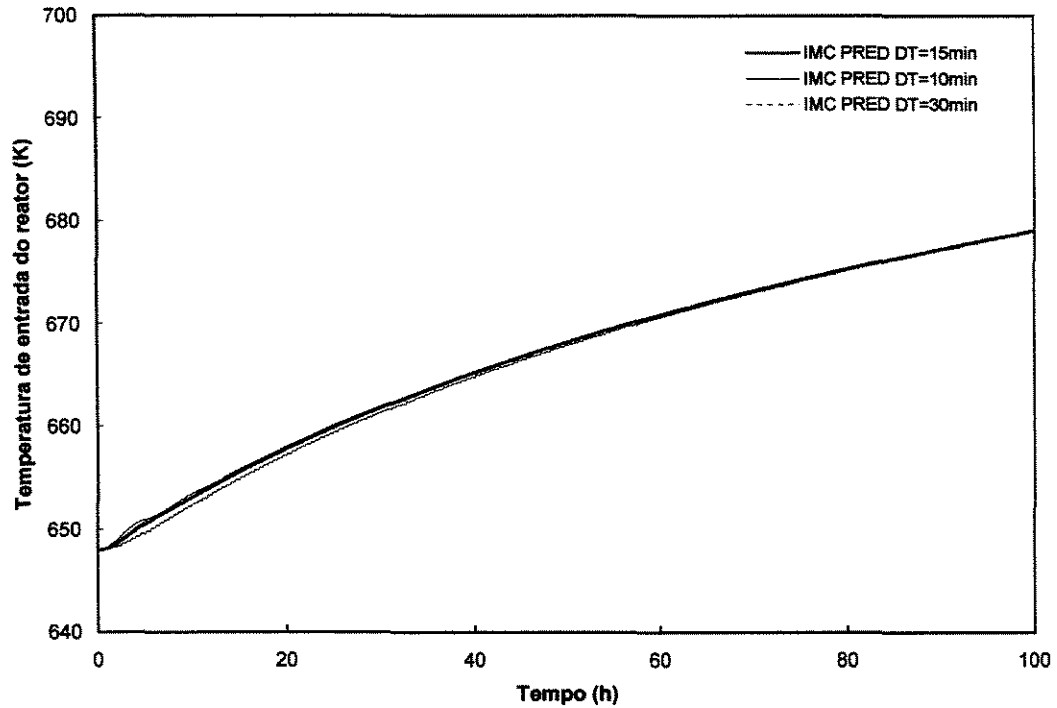


Figura 39. Comportamento da variável manipulada para vários tempos de amostragem.

Observa-se na figura 39, que a diferença na ação do controlador sobre a variável manipulada para os diferentes tempos de amostragem testados, não provoca alterações significativas no valor da temperatura. A maior diferença observada ocorre no início da operação controlada e se reduz com o tempo. Esse comportamento está coerente com o resultado obtido para a variável controlada.

Foram feitos vários cálculos com o objetivo de analisar o efeito da variação dos parâmetros do controlador nas variáveis do processo.

O efeito da variação do horizonte de predição P , para valores fixos do horizonte de controle M , foi melhor visualizado através do cálculo do índice de desempenho ISE (Integral do quadrado do erro), conforme mostrado na figura 40. Para esse cálculo foram adotados os valores $\beta_i = 5,0 \times 10^{-3}$, $\gamma_i = 1,0$ e $\alpha_f = 0$.

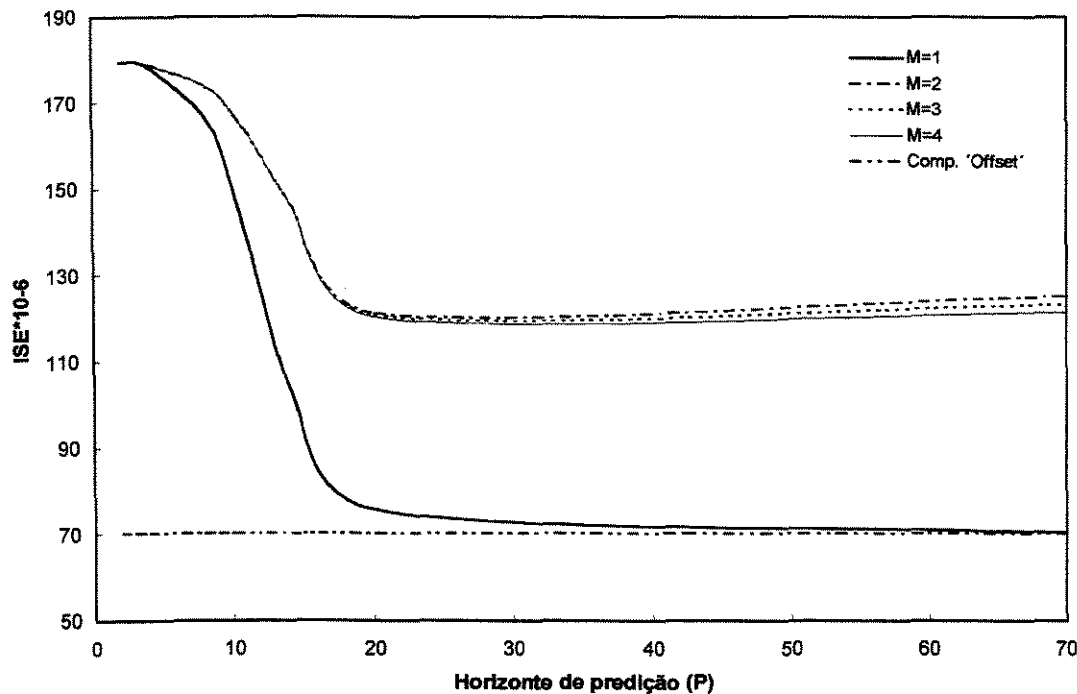


Figura 40. Efeito do horizonte de predição no desempenho do sistema.

As curvas identificadas como $M = 1$ até $M = 4$ apresentam comportamento semelhante, com redução acentuada do erro quando P é aumentado até 20, e tendência a estabilização para valores maiores de P . Esse comportamento está de acordo com as informações estabelecidas na literatura sobre o fato de que em alguns sistemas o horizonte de predição não tem efeito no desempenho a partir de um determinado valor de P . Outros sistemas estabilizam quando são usados um horizonte de controle pequeno e valores elevados para o horizonte de predição (Deshpande, 1988). Em geral, um maior número de predições leva a obtenção de um efeito estabilizante, porém, aumenta o esforço computacional (Seborg, 1989). Observa-se também que para valores de $M \neq 1$ praticamente não ocorre variação no erro.

Os resultados obtidos com o compensador de 'offset' mostram que para qualquer valor de P o erro entre o valor calculado e o desejado para a variável controlada é praticamente nulo.

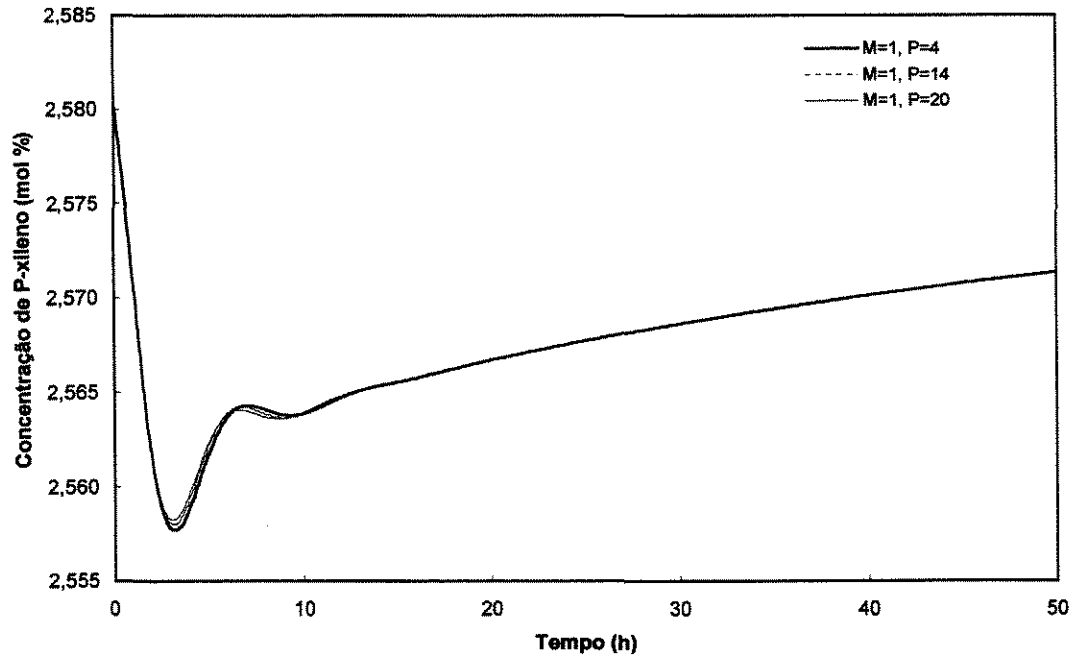


Figura 41. Comportamento da variável controlada para variação em P .

A figura 41 apresenta resultados evidenciando que a influência da variação do horizonte de predição é mínima pois é absorvida pelo controlador. Assim para reduzir o esforço computacional pode-se usar um valor menor para o horizonte de predição sem comprometimento do resultado final. O valor escolhido neste estudo foi $P = 4$.

Para analisar o efeito do horizonte de controle foi considerado o seguinte conjunto de dados: $\Delta t = 15$ min, $N = 70$, $\gamma_i = 1,0$, $\alpha_f = 0$, $P = N$ e sem restrição a alterações na variável manipulada, ou seja, $\beta_i = 0$.

Observa-se na figura 42, para $M > 1$, grande instabilidade com conseqüente divergência do sistema. Porém para $M = 1$ o sistema não apresenta oscilação e converge para a resposta desejada, apresentando, desta forma, comportamento coerente com o descrito por Deshpande, (1989) e Garcia e Morari (1982).

Na figura 43 pode-se observar a ocorrência de ações de controle excessivas provocadas pelo aumento do horizonte de controle (Seborg, 1989) enquanto que para $M = 1$ o sistema mantém elevações suaves da temperatura para suprir os efeitos da dinâmica do

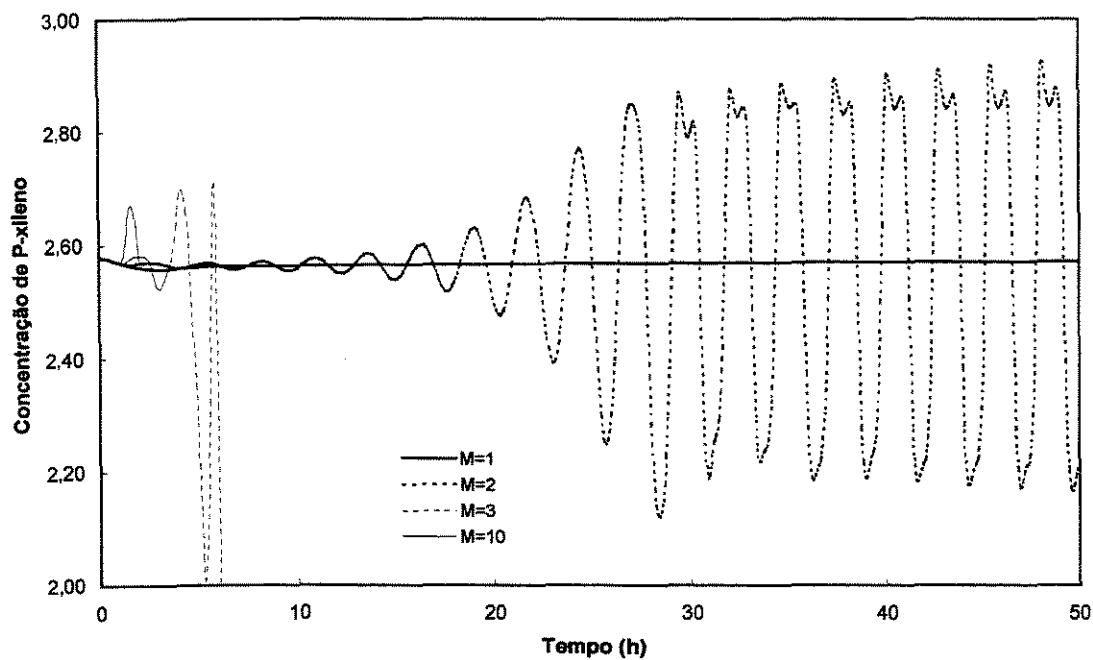


Figura 42. Efeito do horizonte de controle no desempenho do sistema.

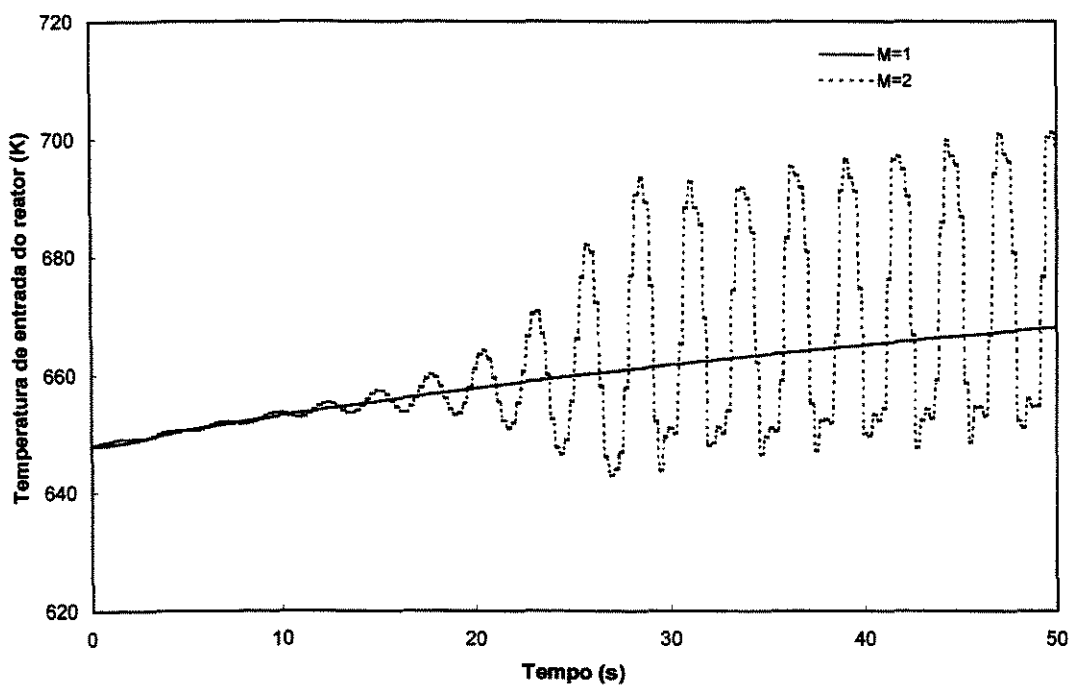


Figura 43. Comportamento da variável manipulada com o tempo.

processo sobre a variável controlada. Esse comportamento está coerente com o resultado apresentado na figura 42.

Para um valor fixo do horizonte de predição e $\beta_i \neq 0$, a variação do horizonte de controle M é completamente absorvida pelo controlador, como evidenciam os resultados apresentados na figura 44 onde existe a coincidência entre as curvas. Também pode-se observar que o comportamento das curvas é estável como estabelecido na teoria do cálculo desse controlador, para o caso de $\beta_i > 0$ (Deshpande, 1988).

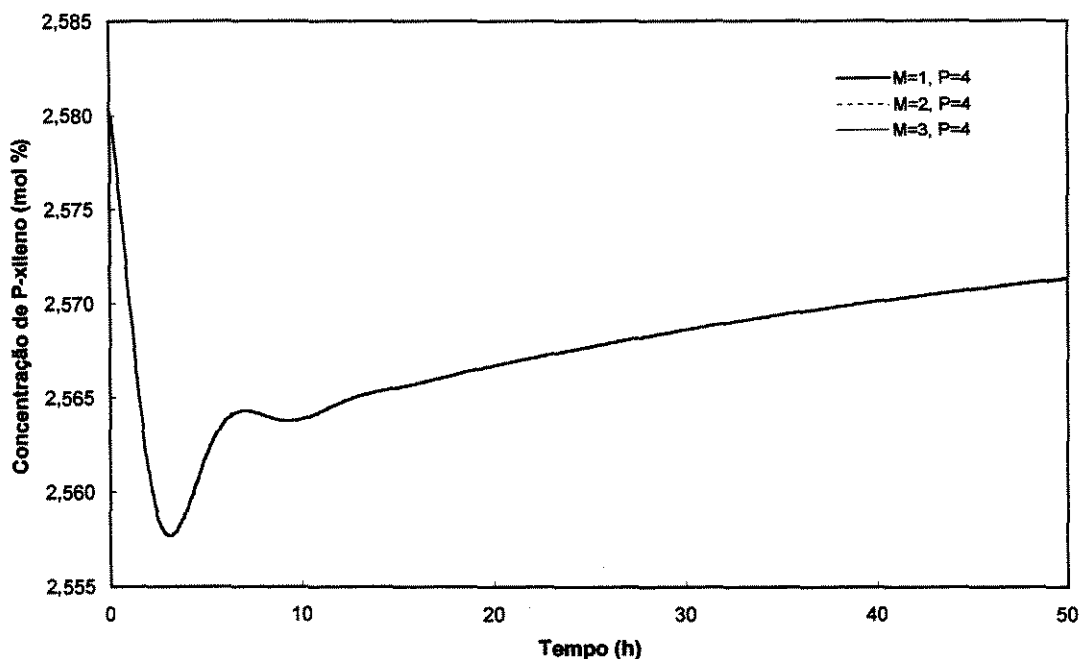


Figura 44. Comportamento da variável controlada para variação em M .

Mantendo o valor dos demais parâmetros e, fazendo $P = N$ e $M = 1$, foram traçadas as curvas da figura 45 para vários valores dos pesos aplicados a variável manipulada, β_i . Os valores foram considerados constantes no horizonte de predição. Os resultados obtidos estão de acordo com a literatura (Garcia e Morari, 1982), indicando que valores maiores de β_i provocam respostas mais lentas e aumentam o afastamento entre os

valores real calculado e desejado da variável controlada. A resposta adequada ao sistema é obtida através do uso do compensador de 'offset'.

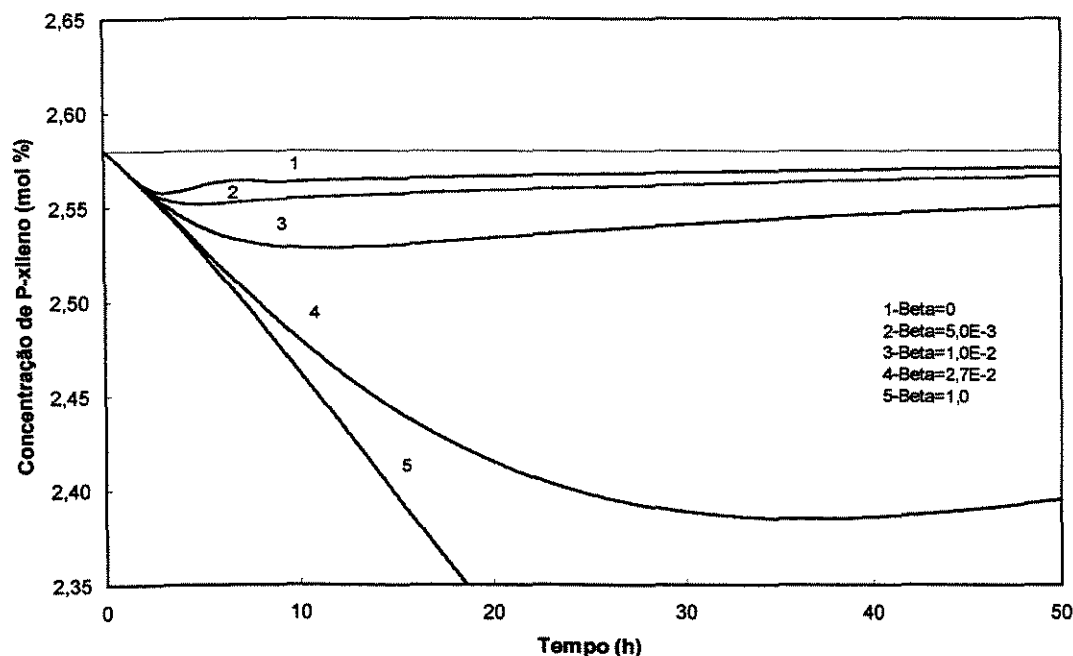


Figura 45. Efeito de β_i no desempenho do sistema.

Na análise do efeito da trajetória de referência no desempenho do sistema, foram usados valores crescentes da constante do filtro α_f , mantendo $P = N$, $M = 1$ e $\beta_i = 0$. Observa-se na figura 46 que a resposta fica mais lenta aumentando o afastamento entre os valores real e desejado da variável controlada, quando aumenta o α_f , porém o sistema não oscila. Esse comportamento está de acordo com o descrito na literatura onde se observa que valores de α_f próximos de zero melhoram o desempenho mas o controlador fica mais sensível aos erros do modelo do processo enquanto valores próximos de um melhoram a robustez porém a resposta do controlador torna-se muito lenta.

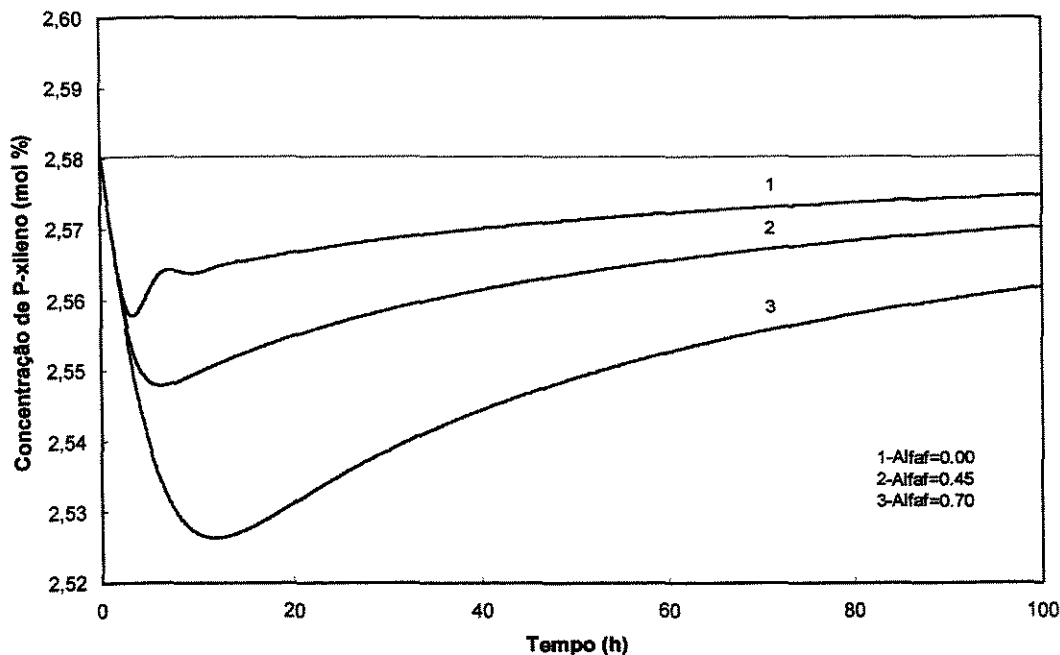


Figura 46. Efeito da trajetória de referência no desempenho do sistema.

Após a simulação do processo o melhor conjunto de parâmetros obtido foi o seguinte: $\Delta t = 15$ min, $N = 70$, $P = 4$, $M = 1$, $\gamma_i = 1,0$, $\beta_i = 5,0 \times 10^{-3}$ e $\alpha_f = 0$.

A figura 47 mostra o resultado da simulação considerando distúrbios sucessivos na vazão total na entrada do reator. O primeiro de +10% após 50 horas de operação controlada seguido de outro de +5% após 120 horas.

A recuperação da variável controlada para o valor desejado após a oscilação demonstra o bom desempenho do controlador na correção das variações provocadas pela dinâmica do sistema combinadas com as alterações na variável de entrada do reator.

O comportamento da variável manipulada para o sistema onde ocorre desativação do catalisador submetido a variações na vazão total de reagentes, está representado na figura 48 demonstrando coerência com o resultado apresentado na figura 47. O aumento da velocidade espacial dentro do leito catalítico provocado pela elevação da vazão, provoca redução do teor da variável controlada na saída do reator, o que é compensado pela elevação da temperatura.

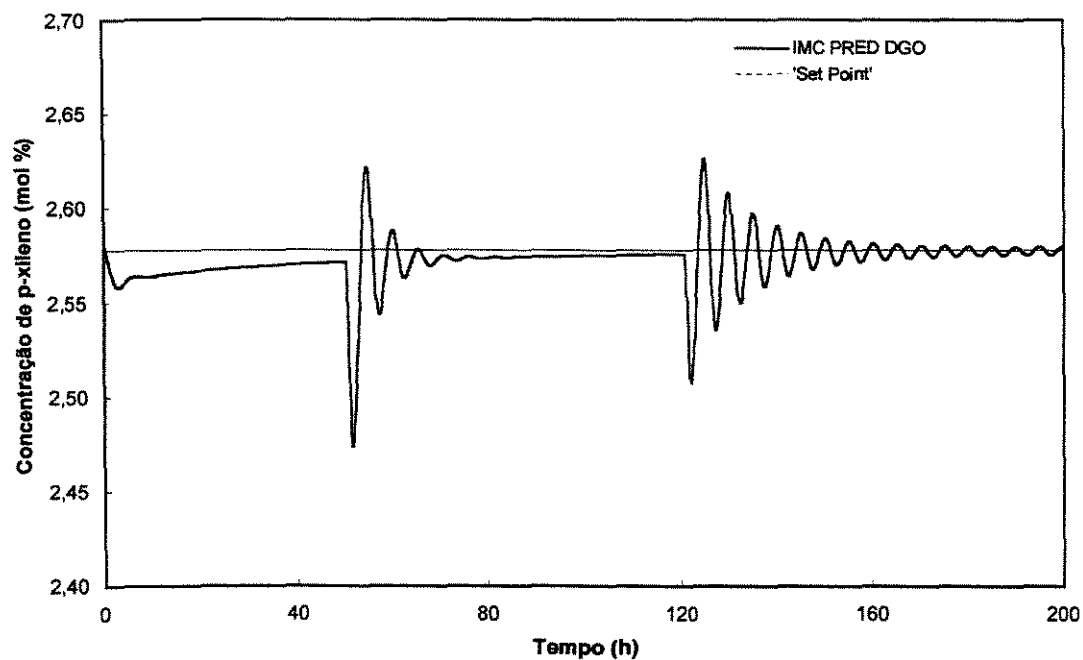


Figura 47. Comportamento da variável controlada com distúrbio na entrada do reator.

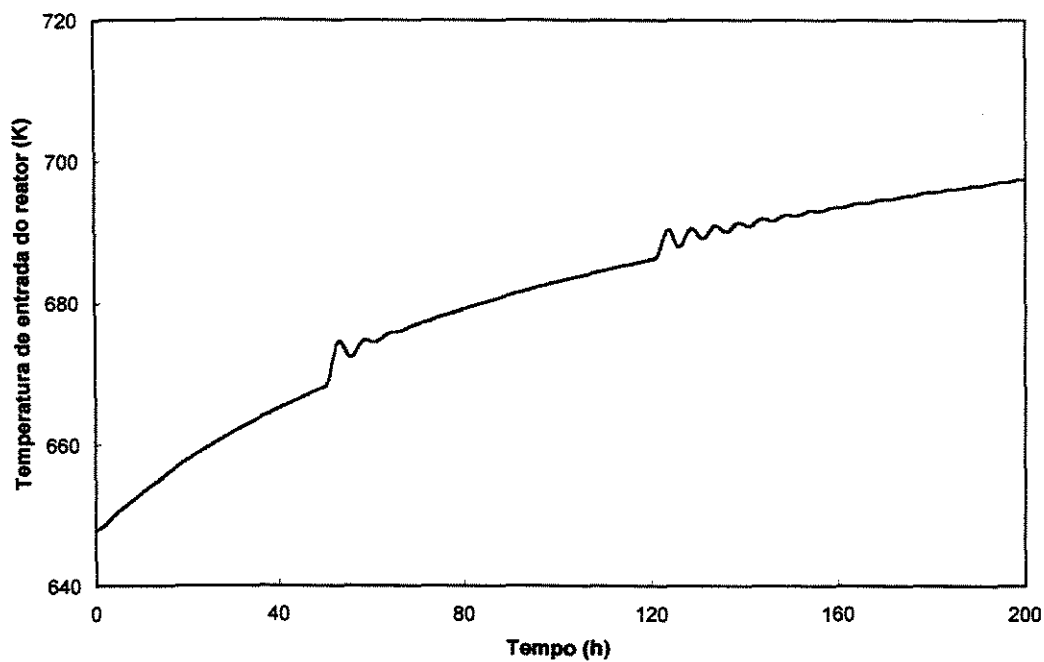


Figura 48. Comportamento da variável manipulada com distúrbio na entrada do reator.

Na figura 49 observa-se o comportamento da variável controlada com o tempo para os controladores IMC com a estrutura básica, IMC com GAP e IMC preditivo aplicados à malha primária do sistema de controle proposto. Observa-se o desempenho superior do controlador IMC preditivo em relação aos outros dois. É obtida uma resposta assintótica com correção mais rápida e, oscilação quase imperceptível no início da operação controlada.

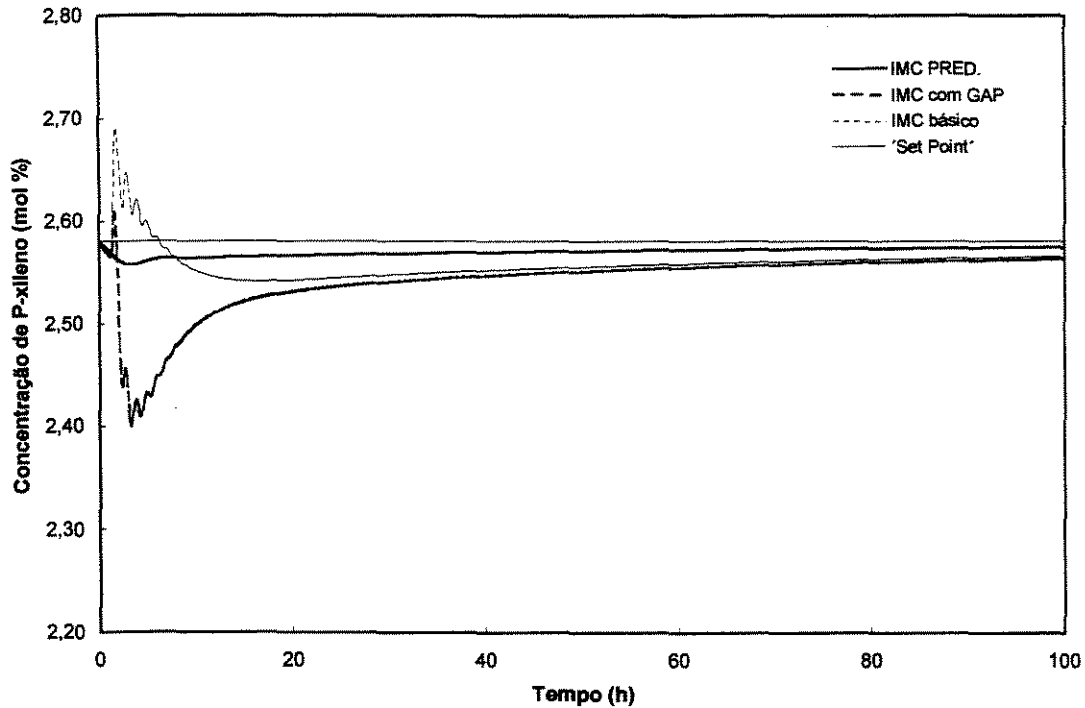


Figura 49. Comparação entre os controladores IMC.

4.5. RESULTADOS OBTIDOS COM O CONTROLADOR PID DIGITAL

Para efeito de comparação foi também aplicado à malha primária o controlador digital convencional PID, descrito pelo algoritmo na forma velocidade modificada, representado pela seguinte equação:

$$\Delta p_n = K_C \left[(e_n - e_{n-1}) + \frac{\Delta t}{\tau_I} \left(\frac{e_n + e_{n-1}}{2} \right) + \frac{\tau_D}{\Delta t} (e_n - 2e_{n-1} + e_{n-2}) \right] \quad (7)$$

onde,

p = sinal de saída do controlador

e = sinal de erro do controlador

O ajuste dos parâmetros desse controlador foi feito pelos métodos de Cohen-Coon, ITAE e IMC, sendo que foram escolhidos os valores obtidos pelo método IMC com $\tau_c = 1$ como ponto de referência por apresentarem melhores resultados. As equações usadas estão listadas abaixo:

$$K_c = \frac{1}{k_p} \cdot \frac{2\left(\frac{\tau_c}{\theta_D}\right) + 1}{2\left(\frac{\tau_c}{\theta_D} + 1\right)}; \quad \tau_I = \frac{\theta_D}{2} + \tau_P \quad \text{e} \quad \tau_D = \frac{\tau_P}{2\left(\frac{\tau_P}{\theta_D}\right) + 1} \quad (12)$$

com $\tau_c / \theta_D > 0,8$; $\tau_c > \tau_P / 10$

O sistema foi descrito por uma função de transferência de primeira ordem com atraso de transporte, obtida da resposta à uma variação em degrau na variável manipulada.

A partir dos dados obtidos, pelo método de ajuste de parâmetros IMC, foi feita a simulação do sistema, onde ocorre desativação do catalisador, para a escolha do melhor conjunto de valores para os parâmetros do controlador, que são: $K_C = 45,3$, $\tau_I = 3,9292 \times 10^{-1}$ e $\tau_D = 2,5783$. Esses valores foram calculados para um intervalo de amostragem de 15 min. Os resultados obtidos são mostrados a seguir.

Observa-se que o comportamento da variável controlada com o tempo, mostrado na figura 50, obtido com os controladores PID e IMC preditivo são praticamente coincidentes. Comportamento semelhante acontece com a variável manipulada conforme observado na figura 51.

O comportamento observado anteriormente não é mantido quando o sistema é submetido a variação na vazão total na entrada do reator, como mostra a figura 52.

Observa-se que enquanto o controlador IMC exibe resposta assintótica retornando a variável controlada ao valor desejado, o controlador PID tem resposta oscilatória com posterior divergência em relação ao valor de referência especificado, necessitando novo ajuste dos parâmetros.

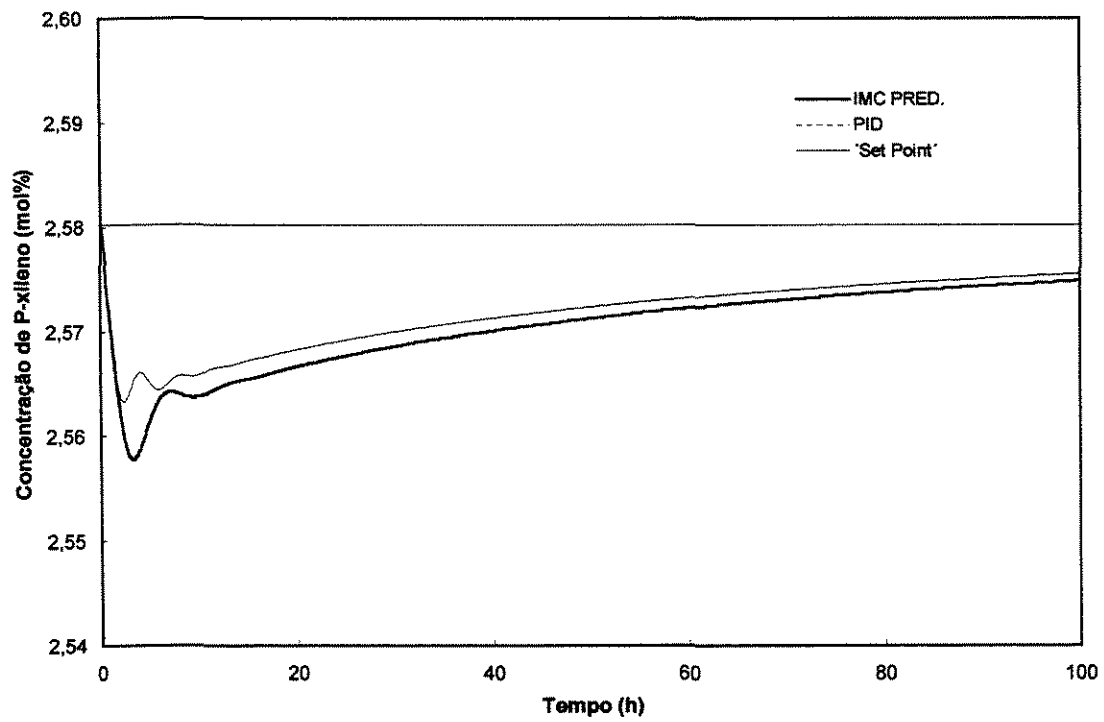


Figura 50. Comportamento da variável controlada com o PID e o IMC preditivo.

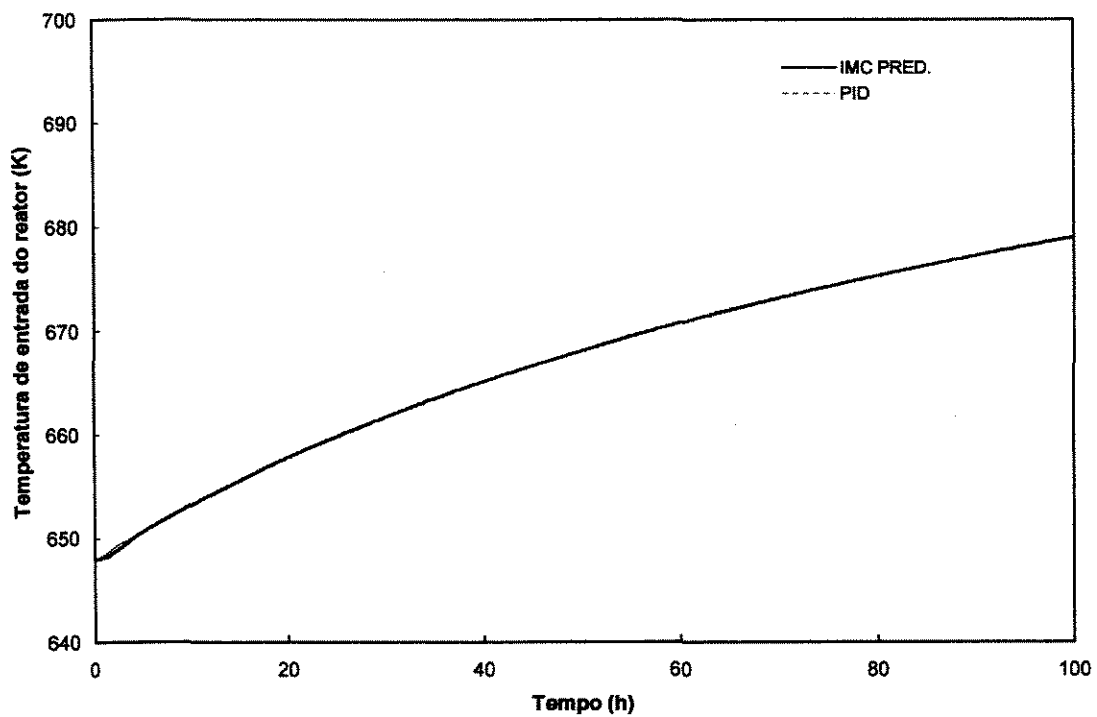


Figura 51. Comportamento da variável manipulada com o PID e o IMC preditivo.

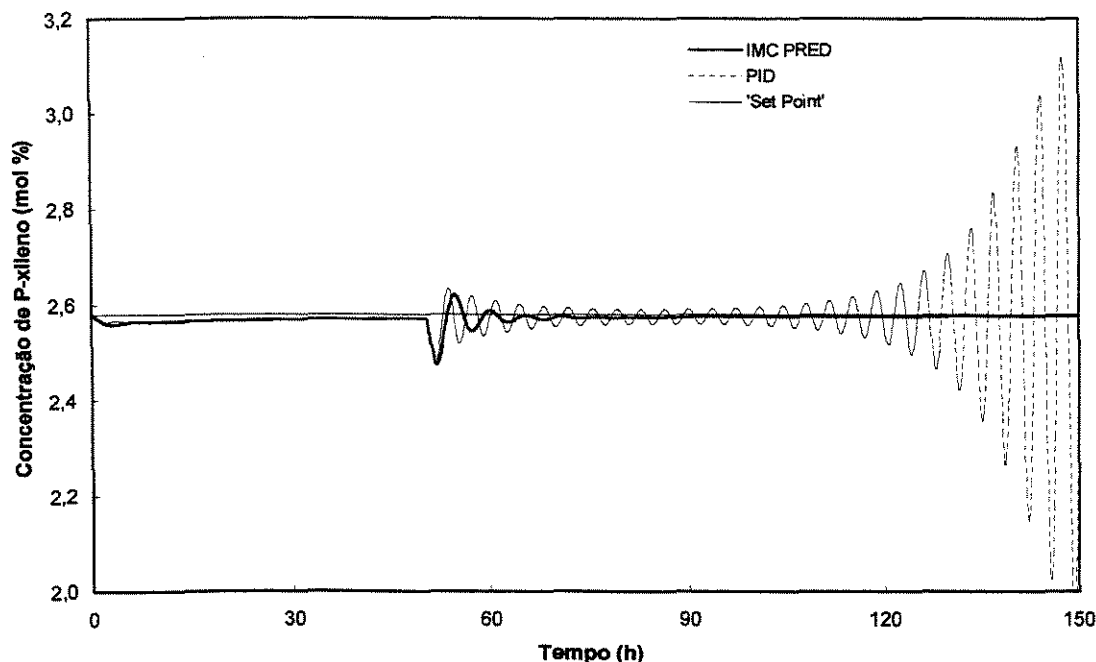


Figura 52. Comportamento da variável controlada para distúrbio na vazão total.

O controlador IMC preditivo apresenta estabilidade e melhor desempenho devido ao fato de ter incluído na sua estrutura um modelo explícito do processo tornando-se mais apropriado para aplicações em sistemas estáveis em malha aberta, que é uma característica encontrada na maioria dos processos industriais (Datta, 1996).

Nas curvas traçadas até aqui os modelos internos utilizados no cálculo dos controladores consideram o catalisador com atividade plena. Porém, os parâmetros do processo variam com o tempo de operação em função da desativação do catalisador e de perturbações outras não medidas. A resposta do sistema a perturbações na entrada é então modificada com o tempo sendo necessário adaptar o modelo interno e consequentemente os ajustes do controlador para essa nova condição. Os sistemas de controle que têm essa característica são adaptativos.

A adaptação deve ser feita em tempo real. A cada intervalo de tempo de amostragem é necessário o uso de uma técnica de identificação que estima os parâmetros do processo continuamente, necessários para a descrição apropriada do modelo da planta.

Esse modelo atualizado do processo é o modelo interno no caso do IMC e será usado como referência para o próximo intervalo de cálculo do controlador. No caso do controlador PID os parâmetros da função de transferência atualizada são usados para o cálculo dos novos ajustes do controlador.

Para ilustrar esse procedimento foi feita uma análise e uma adaptação simplificada do processo controlado pelo PID digital. Foram provocadas perturbações em degrau na temperatura de entrada do reator a cada 30 horas e analisadas as respostas obtidas no processo com desativação do catalisador. Os resultados foram ajustados a equações, usando o MATLAB, para obtenção das funções de transferência que descrevem o processo em cada ponto. As maiores alterações observadas nos parâmetros das funções de transferência foram de 5 % no atraso de transporte, 24% na constante de tempo e 210% no ganho do processo. Os ajustes do controlador calculados para cada ponto apresentaram variações de 10% nas constantes de tempo integral e derivativa e de 60% no ganho. Os resultados obtidos estão apresentados a seguir.

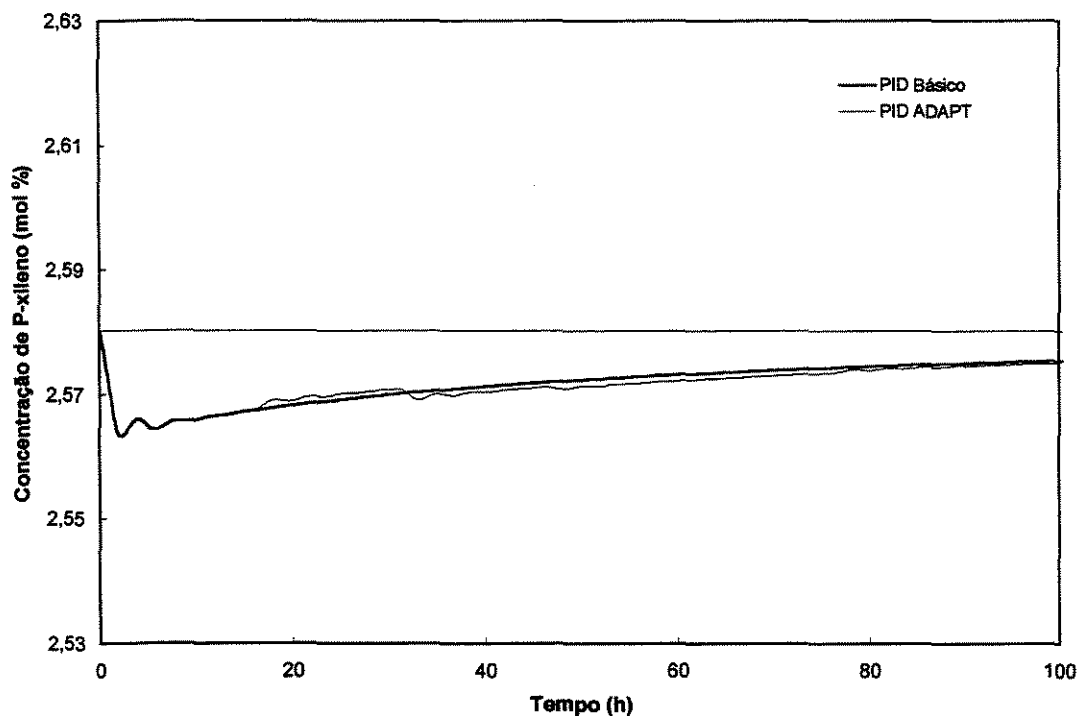


Figura 53. Comportamento da variável controlada com PID.

Na figura 53 está representada a trajetória da variável controlada quando os ajustes do controlador PID são adaptados a cada 30 horas (PID Adapt) comparada à trajetória sem adaptação (PID Básico). Observa-se uma pequena oscilação da variável controlada provocada pela adaptação aproximada que deve ser eliminada quando são utilizadas técnicas mais adequadas de controle adaptativo. A aplicação dessas técnicas não faz parte do escopo deste estudo.

A literatura especializada dispõe de várias aplicações de controladores adaptativos como por exemplo os trabalhos realizados por Chen e Sun (1991) e Datta e Ochoa (1996) sobre a combinação da adaptação com a estrutura do controle com modelo interno (IMC) para obtenção de um esquema de controle com modelo interno adaptativo.

4.6. RESULTADOS OBTIDOS NO CONTROLE DO FORNO

A malha secundária do sistema em cascata proposto corresponde ao controle da temperatura de saída do forno de aquecimento da corrente de alimentação do reator através da manipulação da vazão de combustível. Foram aplicados os controladores IMC preditivo e PID. Este é um problema servo no qual o valor de referência é a temperatura de entrada do reator que varia a cada intervalo de amostragem.

Após simulação do processo para vários conjuntos de parâmetros, foi selecionada a melhor resposta para cada controlador. Os parâmetros escolhidos para o controlador PID são: $K_C = 8,6168 \times 10^{-3}$, $\tau_I = 69,015$ e $\tau_D = 5,4546 \times 10^{-3}$, e para o controlador IMC preditivo são: $N = 70$, $P = 10$, $M = 2$, $\gamma_i = 1,0$, $\beta_i = 5,0 \times 10^{-1}$ e $\alpha_f = 0$. O intervalo de amostragem utilizado no cálculo foi de 10 seg.

Os resultados obtidos são apresentados a seguir.

As curvas apresentadas na figura 54 referem-se às respostas do processo obtidas para variação no 'set point' seguida da variação em degrau de +10% na vazão total de alimentação do forno, após 600s de operação controlada.

Observa-se que o desempenho dos dois controladores são semelhantes na maior parte do tempo sendo que o controlador IMC preditivo apresenta correção mais suave, nos

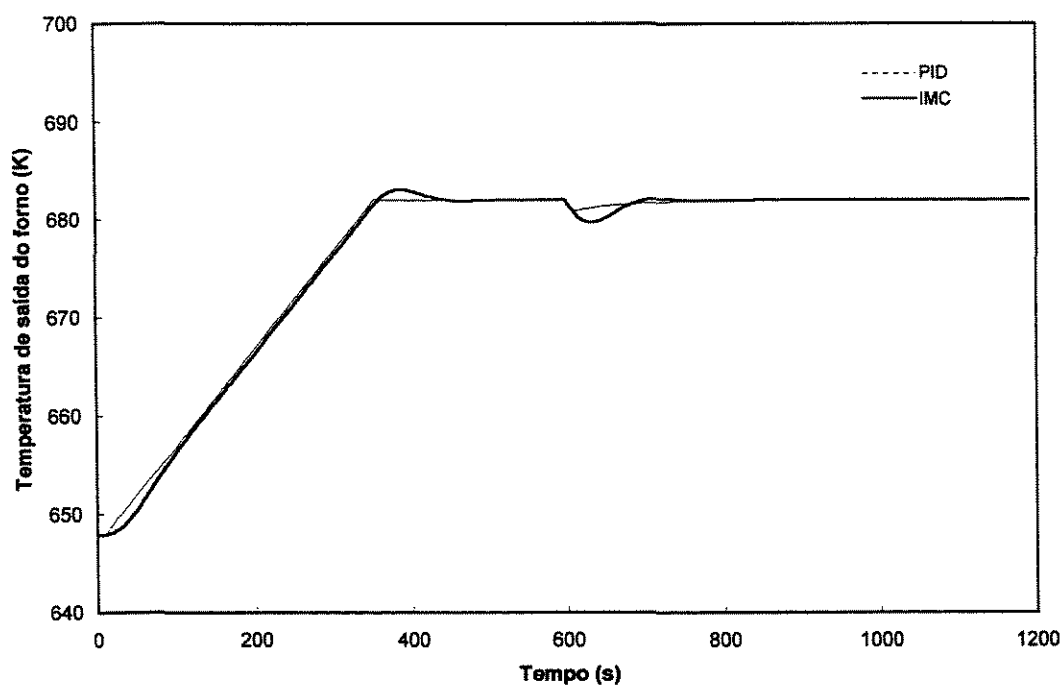


Figura 54. Comportamento da variável controlada com o tempo.

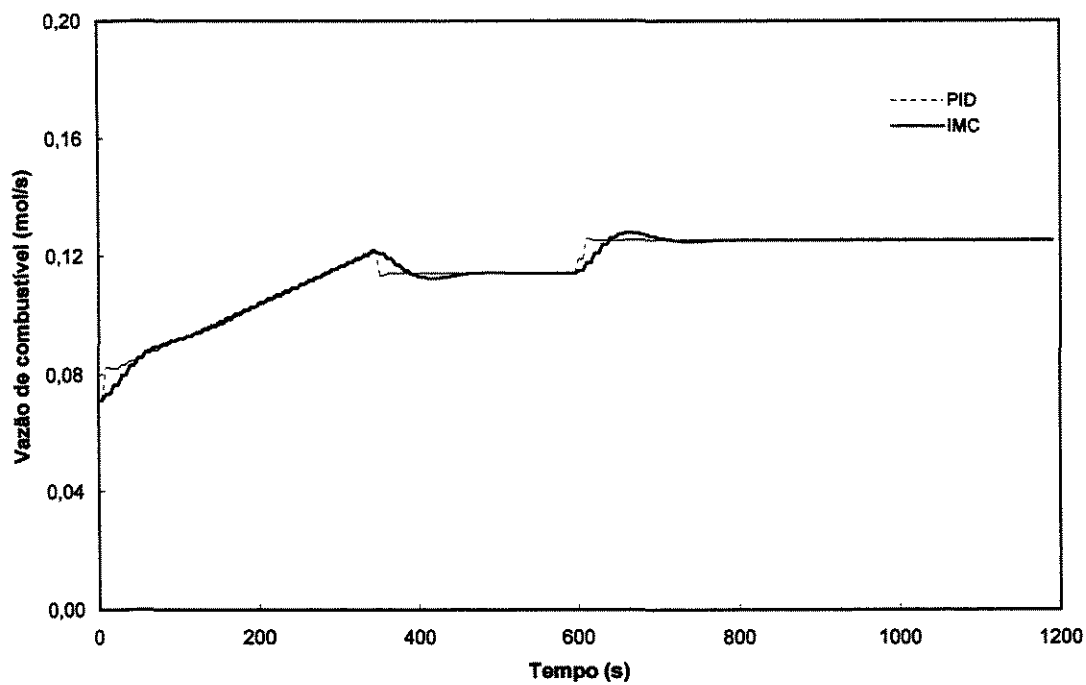


Figura 55. Comportamento da variável manipulada com o tempo.

pontos de variação mais acentuada, evidenciando maior estabilidade do comportamento desse controlador.

A atuação dos controladores sobre a vazão de combustível pode ser vista na figura 55. Não são observadas variações muito bruscas dessa variável quando da ocorrência do distúrbio na vazão total a ser aquecida e o valor máximo observado se encontra abaixo do limite superior calculado para a vazão da válvula, que é 0,2 moles/s. O comportamento da variável manipulada evidencia que as ações de controle são mais suaves para o controlador IMC preditivo a exemplo do que foi observado no comportamento da variável controlada.

4.7. COMENTÁRIOS

A estratégia de controle em cascata proposta para o sistema de isomerização de xilenos onde ocorre desativação do catalisador, foi testada e demonstrou ser eficiente para o controle da concentração na saída do reator.

Foram aplicados a malha primária os controladores IMC com a configuração básica, IMC combinado com o Preditor Analítico Generalizado, IMC preditivo e o PID digital. Foi realizada a simulação do processo para várias condições e apresentados os resultados obtidos, verificando-se a ocorrência de comportamento coerente com o descrito na literatura para todos os controladores. Por exemplo, para o controlador IMC preditivo, o aumento do horizonte de predição produz um controle mais estável porém aumenta o esforço computacional. Valores acima de 20 não têm influência significativa no desempenho do controlador. Valores elevados do horizonte de controle provocam excessiva ação sobre a variável manipulada, com consequente instabilidade no sistema.

Com relação a malha secundária foram aplicados os controladores IMC preditivo e PID que mantiveram a vazão de combustível na faixa desejada de operação.

Os programas foram executados em microcomputador pessoal com processador Pentium 4 e memória de 128 MB. O tempo de processamento para o cálculo da malha primária foi de 6,2 min para o IMC com GAP, 6,4 min para o IMC preditivo e 6,6 min para o PID digital.

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

5.1. CONCLUSÕES

As características apresentadas pela maioria dos processos químicos industriais como, por exemplo, a não-linearidade, a natureza não estacionária, a existência de atraso de transporte no processo e nas medições e a interação entre as variáveis do processo, se constituem em desafios para o controle de processos.

O conhecimento do processo e o desenvolvimento do modelo matemático são determinantes no projeto de sistemas de controle eficientes.

Neste estudo o processo de isomerização de xilenos foi representado por um modelo dinâmico simplificado obtido a partir da aplicação dos princípios de conservação da massa e da energia. Esse modelo considera fenômenos físicos e químicos que ocorrem no processo inclusive a desativação do catalisador provocada por formação e deposição de compostos de carbono.

Para uma determinada relação molar entre o hidrogênio e os hidrocarbonetos, a manutenção do estado de equilíbrio e a recuperação máxima do para-xileno dependem da temperatura de entrada do reator. Esta é elevada continuamente para compensar os efeitos da queda de atividade do catalisador. Esse aumento de temperatura é também determinante na vida útil do catalisador uma vez que a formação e o depósito de coque dependem fortemente da temperatura de reação.

Analisando os resultados obtidos (Fig. 13,14,15) pode-se concluir que o modelo utilizado representa de forma adequada o comportamento dinâmico do reator e permite a avaliação preliminar qualitativa do comportamento das variáveis do processo quando o mesmo é submetido a modificações no estado estacionário. As respostas do sistema para variações em degrau nas principais variáveis do processo estão coerentes com as descrições existentes na literatura (Fig. 17,18,19).

A redução da concentração do para-xileno com o tempo é o resultado da ação da queda da atividade do catalisador que foi bem representada pelo modelo simplificado adotado para a cinética da desativação em várias temperaturas (Fig. 24). Esses resultados evidenciam a importância da temperatura de entrada no controle da concentração na saída do reator.

O efeito de variações na pressão parcial de hidrogênio, uma das principais variáveis do processo, foi analisado e os resultados apresentados confirmam o comportamento descrito na literatura. A presença do hidrogênio no sistema reagente previne a queda acentuada da atividade do catalisador porém, a elevação da pressão parcial desse reagente aumenta a perda de anéis aromáticos reduzindo a concentração de para-xileno na saída (Fig. 16). O ponto ótimo de operação é encontrado levando em consideração também o fator custo.

O modelo dinâmico simplificado elaborado para o forno de aquecimento da mistura reagente, apresentou resultados adequados que atestam a validade do mesmo para o estudo da estratégia de controle proposta.

A estratégia de controle em cascata proposta foi implementada utilizando o controlador com modelo interno IMC, inicialmente na malha primária, em três versões distintas. A primeira considerando a estrutura básica do controlador, a segunda combinando o conceito do Preditor Analítico Generalizado com a técnica do controlador IMC que foi chamada IMC com GAP e a terceira é o IMC preditivo que combina o controlador IMC com o algoritmo de Controle Preditivo com Modelo. Ainda na malha primária foi implementado o controlador PID digital para comparação dos resultados. Na malha secundária foram aplicados os controladores IMC preditivo e PID digital.

Os resultados obtidos mostraram que a estratégia de controle proposta para o sistema de isomerização de xilenos onde ocorre desativação do catalisador é eficiente no controle da concentração na saída do reator.

Os controladores analisados apresentaram resultados concordantes com os da literatura especializada. As versões mais simplificadas do IMC apresentaram resultados menos estáveis do que os obtidos com o IMC preditivo (Fig. 49). Porém, o estudo das versões mais simplificadas foi útil para a comparação dos resultados, análise da possibilidade de utilização de controladores que exigem menor esforço computacional, e estimativa preliminar dos parâmetros do controlador como, por exemplo, o intervalo de amostragem.

Comparando os resultados obtidos com os controladores PID e IMC preditivo, pode-se observar um comportamento muito semelhante entre as respostas dos dois controladores às variações na dinâmica do processo. Porém, quando esses controladores

foram submetidos a um distúrbio adicional na vazão total de carga do reator, a resposta do PID foi oscilatória e divergente (Fig. 52) evidenciando a necessidade de ajuste dos parâmetros desse controlador. Quando a necessidade de ajustes é muito freqüente é recomendado o uso da técnica de controle adaptativo.

Os melhores resultados foram obtidos com o controlador IMC preditivo comprovando a aplicabilidade desse a processos não estacionários e a estabilidade quando submetido a mais de um distúrbio adicional à dinâmica do próprio processo (Fig. 47).

A análise do efeito da variação dos diversos parâmetros ajustáveis desse controlador apresentou resultados condizentes com as aplicações disponíveis na literatura e com as considerações teóricas dessa estratégia de controle.

O controlador IMC preditivo foi aplicado ao forno com a função de mecanismo servo e, mostrou-se tão eficiente quanto no caso regulador do reator. A comparação com o PID digital evidenciou comportamento bastante semelhante das respostas dos dois controladores, indicando que o uso do PID em sistemas de dinâmica simples é uma opção possível com redução do esforço computacional.

5.2. SUGESTÕES

Neste estudo foi considerado que a concentração dos produtos é medida com precisão e tempo hábil, para uma correção satisfatória da temperatura de entrada do reator, pelo controlador. Porém, sabe-se que essa medida não é facilmente obtida e apresenta um atraso de transporte que pode comprometer o desempenho do sistema de controle. Para superar essa dificuldade pode ser utilizada a estratégia de controle inferencial, proposta por Joseph e Brosilow (1978) citados por Chen e Sun (1991), que utiliza medições disponíveis de variáveis que são consideradas secundárias para o processo mas, são facilmente efetuadas com precisão, para estimar e controlar a qualidade do produto. Pode-se escolher em um trabalho futuro a temperatura de saída do reator como medida secundária.

Processos industriais onde ocorrem alterações na atividade do catalisador sofrem variações lentas das condições de operação, não sendo necessária a adaptação dos modelos mais precisos como é o caso do modelo de convolução. Porém, o controle com modelo

interno adaptativo foi estudado por Datta e Ochoa (1996) motivados pela grande popularidade do IMC em aplicações industriais, combinada com a comprovada garantia teórica oferecida pelo controle adaptativo. Em um trabalho futuro esses conceitos podem ser aplicados ao reator de isomerização de xilenos para comparação com os resultados obtidos neste estudo.

No sistema estudado foi considerado que a variável controlada tem comportamento linear em relação à temperatura de entrada do reator devido à diferença absoluta entre os valores das respostas aos degraus positivos e negativos de mesma amplitude estar na faixa de 0,06 mol %. Porém um aumento no valor do degrau implica na ênfase da não linearidade do sistema tornando inadequada a consideração adotada. Existem vários trabalhos publicados com aplicações de métodos diferentes para a introdução da não linearidade nas equações que definem o modelo do processo. Um exemplo é o estudo de Zhan e Ishida (1997) que usaram o controle preditivo com modelo neural. Sugerimos analisar a influência da não linearidade no modelo do reator de isomerização de xilenos em trabalho futuro. Várias estratégias para controle de processo não lineares são apresentadas por Henson e Seborg (1997).

O funcionamento dos processos químicos industriais ocorre sob condições que garantem a segurança operacional desses. Para manter essas condições as variáveis do processo são submetidas a limites ou restrições operacionais. Os pesos aplicados à variável manipulada no caso do controlador IMC preditivo (β_i), limita a variação da ação de controle mas não garante que essa variável se mantenha na faixa operacional adequada. Num trabalho futuro, sugerimos a introdução dos limites máximo e mínimo de operação da variável manipulada no cálculo do controlador.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BHATIA, S., CHANDRA, S., DAS T. Simulation of the Xylene Isomerization Catalytic Reactor. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 28, p. 1185-1190, 1989.
- CARNAHAM, B., LUTHER, H. A., WILKES, J. O. *Applied Numerical Methods*. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1969, 604p.
- CHEN, C., SÚN, C. Adaptive, Inferential Control of Packed-bed Reactors. *Chemical Engineering Science*, v. 46, n. 4, p. 1041-1054, 1991.
- CONTE, S. D., BOOR, C. *de Elementary Numerical Analysis*. Singapore: McGraw-Hill Book Company, 1981, 432p.
- CORELLA, J., ASÚA, J. M. Kinetic Equations of Mechanistic Type With Nonseparable Variables for Catalyst Deactivation by Coke. *Models and Data Analysis Methods. Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v. 21, p. 55-61, 1982.
- CORELLA, J., MONZÓN A. Modeling of the Deactivation Kinetics of Solid Catalysts by Two or more Simultaneous and Different Causes. *Ind., Eng. Chem. Res.*, v. 27, p. 369-374, 1988.
- DATTA, A., OCHOA, J. Adaptive Internal Model Control: Design and Stability Analysis. *Automatica*, v. 32, n. 2, p. 261-266, 1996.
- DE PAUW, R. P., FROMENT, G. F. Deactivation of a Platinum Reforming Catalyst in a Tubular Reactor. *Chemical Engineering Science*, v. 30, p. 789-801, 1975.
- DESHPANDE, P. B., ASH, R. H., *Computer Process Control With Advanced Control Applications*. North Carolina: Instrument Society of América, 1988, 509p.
- DUMÉZ, F. J., FROMENT, G. F., Dehydrogenation of 1-Butene into Butadiene. Kinetics, Catalyst Coking, and Reactor Design. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v. 15, n. 2, p. 291-301, 1976.
- EBERLY, JR. P. E., KIMBERLIN, JR. C. N., MILLER, W. H., DRUSHEL, V. Coke Formation on Silica-alumina Cracking Catalysts. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v. 5, n. 2, p. 193-198, april 1966.
- FROMENT, G. E., BISCHOFF, K. B. Kinetic Data and Product Distributions From Fixed Bed Catalytic Reactors Subject to Catalyst Fouling. *Chemical Engineering Science*, v. 27, p. 105-114, 1962.

- GARCIA, C. E., MORARI, M. Internal Model Control. 1. A Unifying Review and Some New Results, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v. 21, n. 2, p. 308-323, 1982.
- HENRIQUES, C. A., MONTEIRO, J. L. F., MAGNOUX, P., GUINET, M. Characterization of the Coke Formed During O-xylene Isomerization over Modernites at Various Temperatures. *Journal of Catalysis*, v. 172, p. 436-445, 1997.
- HENSON, M. A., SEBORG, D. E. *Nonlinear Process Control*. New Jersey: Prentice Hall PTR, 1997, 432p.
- HORN, I. G., ARULANDU, J. R., GOMBAS, C. J., VANANTWERP, J. G., BRAATZ, R. D. Improved Filter Design in Internal Model Control. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 35, p. 3437 – 3441, 1996.
- HSU, Y. S., LEE, T. Y., HU, H. C. Isomerization of Ethylbenzene and M-xylene on Zeolites. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 27, p. 942-947, 1988.
- LUYBEN, M. L., LUYBEN, W. L. *Essentials of Process Control*. New York: McGraw-Hill, 1997, 584p.
- LUYBEN, W. L. *Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers*. New York: McGraw-Hill, 1990, 725p.
- LUYBEN, W. L., Tuning Proportional-Integral-Derivative Controllers for Integrator/Deadtime Process. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 35, p. 3480 – 3483, 1996.
- MORIN, S., GNEP, N. S., GUINET, M. Influence of Coke Deposits on the Selectivity of M-xylene Transformation and on the Isomerization Mechanism Applied Catalysis. A: General, v. 168, p. 63-68, 1998.
- PIRES, CARLOS AUGUSTO DE MORAES. *Modelagem Matemática e Simulação de Reator Catalítico de Leito Fixo e Fluxo Radial: Aplicação para Reação de Isomerização de Xilenos*. Salvador: Escola Politécnica, Universidade Federal da Bahia, 1997, 149p. Tese (Mestrado).
- REID, R. C., PRAUSNITZ, J. M., SHERWOOD, T. K. *The Properties of Gases and Liquids*. New York: McGraw-Hill, 1977. Appendix A: Property Data Bank, p. 629-665.

RIBEIRO, VANJA CÉLIA SALES. Modelagem e Simulação de Reator Catalítico de Leito Fixo com Desativação do Catalisador. Salvador: Escola Politécnica, Universidade Federal da Bahia, 1995, 124p. Tese (Mestrado)

RICHALET, J., RAULT, A., TESTUD, J. L., JAPON, J. Model Predictive Heuristic Control: Applications to Industrial Processes. *Automática*, v. 14, p. 413-428, 1978.

ROUHANI, R., MEHRA, R. K. Model Algorithmic Control (MAC); Basic Theoretical Properties. *Automatica*, v. 18, n. 4, p. 401-414, 1982.

SEBORG, D. E., EDGAR, T. F., MELLICHAMP, D. A. *Process Dynamics and Control*. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1989, 717 p.

SUBAWALLA, H., PARUCHURI, V. P., GUPTA, A., PANDIT, H. G., RHINEHART, R. R. Comparison of Model-based and Conventional Control: A Sumary of Experimental Results. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 35, p. 3547 – 3559, 1996.

ZHAN, J., ISHIDA, M. The Multi-step Predictive Control of Nonlinear SISO Process with a Neural Model Predictive Control (NMPC) Method. *Computers Chem. Engng.*, v. 21, n. 2, p. 201-210, 1997.

ANEXO 1

LISTAGEM DOS PROGRAMAS PARA SIMULAÇÃO

1. REATOR EM REGIME TRANSIENTE COM DESATIVAÇÃO DO CATALISADOR.

```

*
*
SDEBUG
*****
*****
*
*  MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UM REATOR CATALÍTICO DE FLUXO RADIAL CENTRÍPETO
*  PARA REAÇÕES DE ISOMERIZAÇÃO DE XILENOS, COM DESATIVAÇÃO DO CATALISADOR.
*
*  MODELO UNIDIMENSIONAL, PSEUDO-HOMOGÊNEO, SEM DISPERSÃO DE CALOR E MASSA.
*
*
*  FOI APLICADO O MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS, TRANSFORMANDO AS EQUAÇÕES
*  DIFERENCIAIS PARCIAIS EM ORDINÁRIAS. O SISTEMA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS
*  ORDINÁRIAS RESULTANTE FOI RESOLVIDO PELO MÉTODO DE RUNGE-KUTTA-GILL.
*
*
*  EQUAÇÕES DE BALANÇO
*
*    - BALANÇO DE MASSA PARA O PARA-XILENO
*    - BALANÇO DE MASSA PARA O ORTO-XILENO
*    - BALANÇO DE MASSA PARA O META-XILENO
*    - BALANÇO DE MASSA PARA O HIDROGÊNIO
*    - BALANÇO DE MASSA PARA O ETILBENZENO
*    - BALANÇO DE MASSA PARA O TRIMETILBENZENO
*    - BALANÇO DE MASSA PARA O TOLUENO
*    - BALANÇO DE MASSA PARA O CARBONO
*    - BALANÇO DE ENERGIA
*
*
*  OS COMPOSTOS QUE PARTICIPAM DA REAÇÃO E AS VARIÁVEIS FORAM DISTRIBUÍDOS NOS
*  PONTOS DAS DIFERENÇAS FINITAS, REPRESENTADOS ABAIXO:
*
*    PARA-XILENO  ----> X(1 a N2)
*    ORTO-XILENO  ----> X(N2+1 a 2N2)
*    HIDROGÊNIO   ----> X(2N2+1 a 3N2)
*    ETILBENZENO  ----> X(3N2+1 a 4N2)
*    TRIMETILBENZENO ----> X(4N2+1 a 5N2)
*    TOLUENO      ----> X(5N2+1 a 6N2)
*    META-XILENO  ----> X(6N2+1 a 7N2)
*    TEMPERATURA  ----> X(7N2+1 a 8N2)
*    CARBONO      ----> X(8N2+1 a 9N2)
*    ATIVIDADE    ----> X(9N2+1 a 10N2)
*
*
*  NOMENCLATURA
*
*    X(-) -> SOLUÇÕES DO PROBLEMA
*    N2  -> NÚMERO DE PONTOS TOTAIS (OS DA DIVISÃO DO LEITO MAIS O INICIAL)
*    ROP -> MASSA ESPECÍFICA DA PARTÍCULA DO CATALISADOR
*    DK- -> CONSTANTE DE ADSORÇÃO DOS COMPONENTES DA MISTURA REAGENTE
*    DH- -> CALOR DE REAÇÃO DOS COMPONENTES DA MISTURA REAGENTE
*    AK- -> CONSTANTE DA TAXA DE REAÇÃO PARA OS REAGENTES
*    PT  -> PRESSÃO PARCIAL MÁXIMA DO HIDROGÊNIO
*    P   -> PRESSÃO DO REATOR
*    TR  -> TEMPERATURA DO REATOR
*    TO  -> TEMPERATURA NA ENTRADA DO REATOR
*
*
*****
*****
*
*  PROGRAMA PRINCIPAL
*
*****
*
*  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
*
*
*  DOUBLE PRECISION X(12000),Y(12000),Z(8000),U(8000),V(8000),V1(800
*0),V2(8000)

```



```

DOUBLE PRECISION DKP,DKM,DKO
DOUBLE PRECISION DHPM,DHOM,DHPT
DOUBLE PRECISION DHEBO,DHPTB,DHTOP
DOUBLE PRECISION A1,A3,BK(20),ALFA1,EA(20)
*
COMMON/BLOC1/ GO,PM,EBL,ET,ROP,R2,CP
COMMON/BLOC5/ DKP,DKM,DKO
COMMON/BLOC6/ DHPM,DHOM,DHPT
COMMON/BLOC6A/ DHEBO,DHPTB,DHTOP
COMMON/BLOC7/ PT,DR
COMMON/BLOC8/ Q,A1,A3
COMMON/BLOC9/ BK,EA,R,RR,TM
*
REAL ITEMP
*
OPEN(UNIT=5,FILE='BD1M2ED.DAD',STATUS='OLD')
OPEN(UNIT=6,FILE='BD2M2ED.DAD',STATUS='OLD')
OPEN(UNIT=7,FILE='BD3M2ED.DAD',STATUS='OLD')
OPEN(UNIT=9,FILE='BD4M2EDA.DAD',STATUS='OLD')
OPEN(UNIT=8,FILE='TESEM2.DAT',STATUS='NEW')
*
*-----
* LEITURA DO BANCO DE DADOS
*-----
*
WRITE(*,*)'NÚMERO DE PONTOS DA MALHA = '
READ(*,*)Q
*
READ(5,*) (BK(I),I=1,17),ALFA1
READ(5,*) (EA(I),I=1,16)
READ(5,*) R,RR,TM
*
READ(6,*) GO,PM,EBL,ET,ROP,R1,R2,CP
READ(6,*) DKP,DKM,DKO
READ(6,*) DHPM,DHOM,DHPT,DHEBO,DHPTB,DHTOP
READ(9,*) PT,P,KM,PASSO,TAUM,NP,NW,NFL,DG1,DG2,DG3,DG4,DG5,DG6,D
*G7,NP1,L1
*
DR = (R2-R1)/(R2*Q)
*
READ(7,*) X(1),X(Q+1),X(2*Q+1),X(3*Q+1),X(4*Q+1),X(5*Q+1),
*X(6*Q+1),X(7*Q+1),X(8*Q+1),X(9*Q+1),X(10*Q+1)
*
P1=P
GO1=GO
*
X(1) = X(1)/PT
X(1+Q) = X(Q+1)/PT
X(1+2*Q) = X(2*Q+1)/PT
X(1+3*Q) = X(3*Q+1)/PT
X(1+4*Q) = X(4*Q+1)/PT
X(1+5*Q) = X(5*Q+1)/PT
X(1+6*Q) = X(6*Q+1)/PT
X(1+7*Q) = X(7*Q+1)/TM
X(1+8*Q) = X(8*Q+1)
X(1+9*Q) = X(9*Q+1)
X(1+10*Q) = X(10*Q+1)
*
DO 9 I=2,Q
X(I) = 0.0
X(I+Q) = 0.0
X(I+2*Q) = 0.0
X(I+3*Q) = 0.0
X(I+4*Q) = 0.0
X(I+5*Q) = 0.0
X(I+6*Q) = 0.0
X(I+7*Q) = X(7*Q+1)
X(I+8*Q) = 0.0
X(I+9*Q) = 1.0
9 X(I+10*Q) = 0.0
*
ITEMP = 0.0

```

```

      CALL TEMPO (ITEMP)
*
*-----
*  CÁLCULO DAS CONSTANTES DAS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS
*-----
*
      A1 = GO*PT/(PM*(1-EBL)*ROP*R2*P)
      A3 = ((1-EBL)*ROP*R2)/(GO*CP*ET*TM)
*
*-----
*  CÁLCULO DA COMPOSIÇÃO E TEMPETATURA EM CADA PONTO DAS DIFERENCAS FINITAS
*-----
*
      WRITE (*,20)
*   WRITE (8,20)
20  FORMAT (////,8X,'CONC.P-X',4X,'CONC.O-X',5X,'CONC.H2',5X,'CONC.E
      *BZ',5X,'CONC.TMB',5X,'CONC.TOL',4X,'CONC.M-X',4X,'TEMPERATURA',4
      *X,'CARBONO',4X,'ATIVIDADE',//)
*
      L=1
      CONI=1
      CONT=1
      CONTAS=1
      DO 10 TAU=1,TAUM
      TT=((TAU*R2*P1*PM)/(GO1*RR*TM))*2.7778E-4
      IF(CONI.NE.NP1)GOTO 11
      GO=GO*DG1
      DO 8 I=1,1
      X(I) = DG4*X(1)
      X(I+Q) = DG5*X(Q+1)
      X(I+2*Q) = DG3*X(2*Q+1)
      X(I+3*Q) = X(3*Q+1)
      X(I+4*Q) = X(4*Q+1)
      X(I+5*Q) = X(5*Q+1)
      X(I+6*Q) = DG6*X(6*Q+1)
      X(I+7*Q) = DG7*X(7*Q+1)
      X(I+8*Q) = X(8*Q+1)
8    X(I+9*Q) = X(9*Q+1)
      TT1=TT
      TAU1=TAU
      A1 = GO*PT/(PM*(1-EBL)*ROP*R2*P)
      A3 = ((1-EBL)*ROP*R2)/(GO*CP*ET*TM)
      IF(CONLEQ.NP1)HT=1.0
      IF(CONLEQ.NP1)GOTO 12
11   IF(CONTAS.NE.NFI)GOTO 7
      CONTAS=0
      DO 6 I = 2,Q
      X(I+9*Q) = DEXP(-ALFA1*X(I+8*Q))
6    CONTINUE
7    CALL RKG (PASSO,Q,X)
      HT=0.0
      DO 4 I = 1,Q
      X(I+10*Q)=X(10*Q+I)+X(8*Q+I)
4    CONTINUE
      IF(TAU.EQ.1)GOTO 12
      IF(CONT.NE.NP)GOTO 13
*
*-----
*  IMPRESSÃO DOS RESULTADOS OBTIDOS
*-----
*
12  TT=TT-TT1
      TAU2=TAU-TAU1
*   KW=KW+1
      WRITE (*,15) TT
*   WRITE (8,15) TT
15  FORMAT (/,8X,TEMPO=,F8.4,2X,h,/)
      DO 16 I=1,Q
      Y(I) = X(I)*PT*100/P
      Y(I+Q) = X(Q+I)*PT*100/P
      Y(I+2*Q) = X(2*Q+I)*PT*100/P
      Y(I+3*Q) = X(3*Q+I)*PT*100/P
      Y(I+4*Q) = X(4*Q+I)*PT*100/P

```

```

Y(I+5*Q) = X(5*Q+I)*PT*100/P
Y(I+6*Q) = X(6*Q+I)*PT*100/P
Y(I+7*Q) = X(7*Q+I)*TM
Y(I+8*Q) = X(8*Q+I)
Y(I+9*Q) = X(9*Q+I)
Y(I+10*Q) = X(10*Q+I)
16 CONTINUE
U(L)=Y(Q)
U(L+KM) = Y(2*Q)
U(L+2*KM) = Y(3*Q)
U(L+3*KM) = Y(4*Q)
U(L+4*KM) = Y(5*Q)
U(L+5*KM) = Y(6*Q)
U(L+6*KM) = Y(7*Q)
U(L+7*KM) = Y(8*Q)
U(L+8*KM) = Y(9*Q)
U(L+9*KM) = Y(10*Q)
U(L+10*KM) = Y(11*Q)
DO 25 I=1,Q
WRITE(*,30) (Y(J),J=I,I+10*Q,Q)
30 FORMAT (1X,11F14.7)
25 CONTINUE
* IF(KW.NE.NW)GOTO 18
* WRITE (8,17) TT
* 17 FORMAT (/,'8X,TEMPO=',F8.4,2X,'h',/)
* DO 22 I=1,Q
* WRITE (8,21) (Y(J),J=I,I+10*Q,Q)
* 21 FORMAT (1X,11F14.7)
* 22 CONTINUE
* KW = 0
18 CARB=0
ATIV=0
DO 19 I=1,Q
CARB=CARB+X(8*Q+I)
ATIV=ATIV+X(9*Q+I)
19 CONTINUE
Z(L)=TT
V(L)=TAU2/TAUM
V1(L)=CARB/Q
V2(L)=ATIV/Q
L=L+1
IF(HT.EQ.1.0)GOTO 11
*
CONT=0
13 CONT=CONT+1
CONI=CONI+1
CONTAS=CONTAS+1
10 CONTINUE
WRITE (8,23) TT
23 FORMAT (/,'8X,TEMPO=',F8.4,2X,'h',/)
DO 27 I=1,Q
WRITE (8,29) (Y(J),J=I,I+10*Q,Q)
29 FORMAT (1X,11F14.7)
27 CONTINUE
K=L
T1=Y(Q)+Y(2*Q)+Y(7*Q)
T2=Y(Q)/T1*100
T3=Y(2*Q)/T1*100
T4=Y(7*Q)/T1*100
WRITE(*,31)T2,T3,T4,T1,CONI,TAU,TT1,ALFA1
WRITE(8,31)T2,T3,T4,T1,CONI,TAU,TT1,ALFA1
WRITE(8,35)BK(17)
35 FORMAT(2X,1F9.8)
WRITE(*,34)DG1,DG3,DG4,DG5,DG6,DG7,Q,CONT
WRITE(8,34)DG1,DG3,DG4,DG5,DG6,DG7,Q,CONT
WRITE(8,32)
31 FORMAT(/,2X,8F9.2)
34 FORMAT(/,2X,8F9.4)
32 FORMAT(/,2X,TEMPO',9X,'P-X',8X,'O-X',10X,'H2',8X,'EBZ',9X,'TMBZ'
*,7X,'TOL',8X,'M-X',5X,'TSAIDA',5X,'CARBONO',5X,'ATIVID',3X,'SOMACA'
*RB',3X,'CARBMED',3X,'ATIVDMED',3X,'TADIMENS')
DO 26 L=L1,K-1
WRITE(8,33)Z(L),(U(J),J=L,L+10*KM,KM),V1(L),V2(L),V(L)

```

```

33 FORMAT(1X,F7.2,1X,11F11.6,1X,3F8.6,1X,)
26 CONTINUE
CALL TEMPO (ITEMP)
WRITE (*,*)
WRITE (*,*) TEMPO DE EXECUÇÃO =,ITEMP
* WRITE (8,*) TEMPO DE EXECUÇÃO =,ITEMP
*
*-----
* FINAL DO PROGRAMA PRINCIPAL
*-----
*
STOP
END
*
*
*****
*****
*
* SUBROTINA RUNGE-KUTTA-GILL
*
*****
*****
*
SUBROUTINE RKG (PASSO,Q,X)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
*
DIMENSION C(4,8000),X(12000),F(12000),Y(12000)

C
CO = SQRT(2.0)
DO 10 I = 2,Q
Y(I) = X(I)
Y(I+Q) = X(I+Q)
Y(I+2*Q) = X(I+2*Q)
Y(I+3*Q) = X(I+3*Q)
Y(I+4*Q) = X(I+4*Q)
Y(I+5*Q) = X(I+5*Q)
Y(I+6*Q) = X(I+6*Q)
Y(I+7*Q) = X(I+7*Q)
Y(I+8*Q) = X(I+8*Q)
10 Y(I+9*Q) = X(I+9*Q)
*
CALL FUNC(X,F)
*
DO 20 I = 2,Q
C(1,I) = PASSO*F(I)
X(I) = X(I) + C(1,I)/2
C(1,I+Q) = PASSO*F(I+Q)
X(I+Q) = X(I+Q) + C(1,I+Q)/2
C(1,I+2*Q) = PASSO*F(I+2*Q)
X(I+2*Q) = X(I+2*Q) + C(1,I+2*Q)/2
C(1,I+3*Q) = PASSO*F(I+3*Q)
X(I+3*Q) = X(I+3*Q) + C(1,I+3*Q)/2
C(1,I+4*Q) = PASSO*F(I+4*Q)
X(I+4*Q) = X(I+4*Q) + C(1,I+4*Q)/2
C(1,I+5*Q) = PASSO*F(I+5*Q)
X(I+5*Q) = X(I+5*Q) + C(1,I+5*Q)/2
C(1,I+6*Q) = PASSO*F(I+6*Q)
X(I+6*Q) = X(I+6*Q) + C(1,I+6*Q)/2
C(1,I+7*Q) = PASSO*F(I+7*Q)
X(I+7*Q) = X(I+7*Q) + C(1,I+7*Q)/2
C(1,I+8*Q) = PASSO*F(I+8*Q)
20 X(I+8*Q) = X(I+8*Q) + C(1,I+8*Q)/2
*
CALL FUNC(X,F)
*
DO 30 I = 2,Q
C(2,I) = PASSO*F(I)
X(I) = Y(I) + (CO - 1.0)*C(1,I)/2.0 + (2.0
1 - CO)*C(2,I)/2.0
C(2,I+Q) = PASSO*F(I+Q)
X(I+Q) = Y(I+Q) + (CO - 1.0)*C(1,I+Q)/2.0 + (2.0
1 - CO)*C(2,I+Q)/2.0

```

```

C(2,I+2*Q) = PASSO*F(I+2*Q)
X(I+2*Q) = Y(I+2*Q) + (CO - 1.0)*C(1,I+2*Q)/2.0 + (2.0
1 - CO)*C(2,I+2*Q)/2.0
C(2,I+3*Q) = PASSO*F(I+3*Q)
X(I+3*Q) = Y(I+3*Q) + (CO - 1.0)*C(1,I+3*Q)/2.0 + (2.0
1 - CO)*C(2,I+3*Q)/2.0
C(2,I+4*Q) = PASSO*F(I+4*Q)
X(I+4*Q) = Y(I+4*Q) + (CO - 1.0)*C(1,I+4*Q)/2.0 + (2.0
1 - CO)*C(2,I+4*Q)/2.0
C(2,I+5*Q) = PASSO*F(I+5*Q)
X(I+5*Q) = Y(I+5*Q) + (CO - 1.0)*C(1,I+5*Q)/2.0 + (2.0
1 - CO)*C(2,I+5*Q)/2.0
C(2,I+6*Q) = PASSO*F(I+6*Q)
X(I+6*Q) = Y(I+6*Q) + (CO - 1.0)*C(1,I+6*Q)/2.0 + (2.0
1 - CO)*C(2,I+6*Q)/2.0
C(2,I+7*Q) = PASSO*F(I+7*Q)
X(I+7*Q) = Y(I+7*Q) + (CO - 1.0)*C(1,I+7*Q)/2.0 + (2.0
1 - CO)*C(2,I+7*Q)/2.0
C(2,I+8*Q) = PASSO*F(I+8*Q)
X(I+8*Q) = Y(I+8*Q) + (CO - 1.0)*C(1,I+8*Q)/2.0 + (2.0
1 - CO)*C(2,I+8*Q)/2.0
30 CONTINUE
*
CALL FUNC(X,F)
*
DO 40 I = 2,Q
C(3,I) = PASSO*F(I)
X(I) = Y(I) - CO*C(2,I)/2.0 + (CO/2.0
1 + 1.0)*C(3,I)
C(3,I+Q) = PASSO*F(I+Q)
X(I+Q) = Y(I+Q) - CO*C(2,I+Q)/2.0 + (CO/2.0
1 + 1.0)*C(3,I+Q)
C(3,I+2*Q) = PASSO*F(I+2*Q)
X(I+2*Q) = Y(I+2*Q) - CO*C(2,I+2*Q)/2.0 + (CO/2.0
1 + 1.0)*C(3,I+2*Q)
C(3,I+3*Q) = PASSO*F(I+3*Q)
X(I+3*Q) = Y(I+3*Q) - CO*C(2,I+3*Q)/2.0 + (CO/2.0
1 + 1.0)*C(3,I+3*Q)
C(3,I+4*Q) = PASSO*F(I+4*Q)
X(I+4*Q) = Y(I+4*Q) - CO*C(2,I+4*Q)/2.0 + (CO/2.0
1 + 1.0)*C(3,I+4*Q)
C(3,I+5*Q) = PASSO*F(I+5*Q)
X(I+5*Q) = Y(I+5*Q) - CO*C(2,I+5*Q)/2.0 + (CO/2.0
1 + 1.0)*C(3,I+5*Q)
C(3,I+6*Q) = PASSO*F(I+6*Q)
X(I+6*Q) = Y(I+6*Q) - CO*C(2,I+6*Q)/2.0 + (CO/2.0
1 + 1.0)*C(3,I+6*Q)
C(3,I+7*Q) = PASSO*F(I+7*Q)
X(I+7*Q) = Y(I+7*Q) - CO*C(2,I+7*Q)/2.0 + (CO/2.0
1 + 1.0)*C(3,I+7*Q)
C(3,I+8*Q) = PASSO*F(I+8*Q)
X(I+8*Q) = Y(I+8*Q) - CO*C(2,I+8*Q)/2.0 + (CO/2.0
1 + 1.0)*C(3,I+8*Q)
40 CONTINUE
*
CALL FUNC(X,F)
*
DO 50 I = 2,Q
C(4,I) = PASSO*F(I)
X(I) = Y(I) + (C(1,I) + C(4,I))/6.0 + (2.0 - CO)
1 *C(2,I)/6.0 + (CO/2.0 + 1.0)*C(3,I)/3.0
C(4,I+Q) = PASSO*F(I+Q)
X(I+Q) = Y(I+Q) + (C(1,I+Q) + C(4,I+Q))/6.0 + (2.0 - CO)
1 *C(2,I+Q)/6.0 + (CO/2.0 + 1.0)*C(3,I+Q)/3.0
C(4,I+2*Q) = PASSO*F(I+2*Q)
X(I+2*Q) = Y(I+2*Q) + (C(1,I+2*Q) + C(4,I+2*Q))/6.0 +
1 (2.0 - CO)*C(2,I+2*Q)/6.0 + (CO/2.0 + 1.0)*C(3,I+2*Q)/3.0
C(4,I+3*Q) = PASSO*F(I+3*Q)
X(I+3*Q) = Y(I+3*Q) + (C(1,I+3*Q) + C(4,I+3*Q))/6.0 +
1 (2.0 - CO)*C(2,I+3*Q)/6.0 + (CO/2.0 + 1.0)*C(3,I+3*Q)/3.0
C(4,I+4*Q) = PASSO*F(I+4*Q)
X(I+4*Q) = Y(I+4*Q) + (C(1,I+4*Q) + C(4,I+4*Q))/6.0 +
1 (2.0 - CO)*C(2,I+4*Q)/6.0 + (CO/2.0 + 1.0)*C(3,I+4*Q)/3.0

```

```

C(4,I+5*Q) = PASSO*F(I+5*Q)
X(I+5*Q) = Y(I+5*Q) + (C(1,I+5*Q) + C(4,I+5*Q))/6.0 +
1 (2.0 - CO)*C(2,I+5*Q)/6.0 + (CO/2.0 + 1.0)*C(3,I+5*Q)/3.0
C(4,I+6*Q) = PASSO*F(I+6*Q)
X(I+6*Q) = Y(I+6*Q) + (C(1,I+6*Q) + C(4,I+6*Q))/6.0 +
1 (2.0 - CO)*C(2,I+6*Q)/6.0 + (CO/2.0 + 1.0)*C(3,I+6*Q)/3.0
C(4,I+7*Q) = PASSO*F(I+7*Q)
X(I+7*Q) = Y(I+7*Q) + (C(1,I+7*Q) + C(4,I+7*Q))/6.0 +
1 (2.0 - CO)*C(2,I+7*Q)/6.0 + (CO/2.0 + 1.0)*C(3,I+7*Q)/3.0
C(4,I+8*Q) = PASSO*F(I+8*Q)
X(I+8*Q) = Y(I+8*Q) + (C(1,I+8*Q) + C(4,I+8*Q))/6.0 +
1 (2.0 - CO)*C(2,I+8*Q)/6.0 + (CO/2.0 + 1.0)*C(3,I+8*Q)/3.0
50 CONTINUE
RETURN
END
*
*****
*****
*
* SUBROTINA PARA O CÁLCULO DAS FUNÇÕES
*
*****
*
SUBROUTINE FUNC(X,F)
*
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
*
DOUBLE PRECISION X(12000)
DOUBLE PRECISION DKP,DKM,DKO,F(12000)
DOUBLE PRECISION DHPM,DHOM,DHPT
DOUBLE PRECISION DHEBO,DHPTB,DHTOP
DOUBLE PRECISION A1,A3,BK(20),AK(20),EA(20)
*
COMMON/BLOC1/ GO,PM,EBL,ET,ROP,R2,CP
COMMON/BLOC5/ DKP,DKM,DKO
COMMON/BLOC6/ DHPM,DHOM,DHPT
COMMON/BLOC6A/ DHEBO,DHPTB,DHTOP
COMMON/BLOC7/ PT,DR
COMMON/BLOC8/ Q,A1,A3
COMMON/BLOC9/ BK,EA,R,RR,TM
*
DO 100 J = 2,Q
*
*-----
* CÁLCULO DA CONSTANTE DA TAXA
*-----
*
DO 9 I=1,16
9 AK(I) = BK(I)*DEXP(-EA(I)/(R*X(J+7*Q)*TM))
DO 10 I=17
10 AK(I) = BK(I)
*
*-----
* EQUAÇÃO DE BALANÇO DE MASSA PARA O PARA-XILENO
*-----
*
E1 = 1*(AK(1)*DKP*X(J)-AK(2)*DKM*X(J+6*Q))
E2 = PT/(1+(DKP*X(J)+DKM*X(J+6*Q)+DKO*X(J+Q))*PT)
E3 = AK(5)*X(J+2*Q)*X(J)*PT**2-0.21*AK(8)*X(J+3*Q)*PT
E4 = (AK(10)*X(J)**2-AK(11)*X(J+4*Q)*X(J+5*Q))*PT**2
E5 = (AK(16)*X(J+5*Q)**2)*PT**2
EL = (E1*E2+E3+E4-0.12*E5)*X(J+9*Q)
*
F(J) = (-1/(ET*DR))*(-X(J-1)+X(J)) - (1/(ET*A1))*EL
*
*-----
* EQUAÇÃO DE BALANÇO DE MASSA PARA O ORTO-XILENO
*-----
*
E6 = 1*(AK(4)*DKO*X(J+Q)-AK(3)*DKM*X(J+6*Q))
E8 = AK(6)*X(J+2*Q)*X(J+Q)*PT**2-0.32*AK(8)*X(J+3*Q)*PT
E9 = (AK(12)*X(J+Q)**2-AK(13)*X(J+4*Q)*X(J+5*Q))*PT**2
EB = (E6*E2+E8+E9-0.11*E5)*X(J+9*Q)

```

```

*
* F(J+Q) = (-1/(ET*DR))*(-X(J+Q-1)+X(J+Q))-(1/(ET*A1))*EB
*
* -----
* EQUAÇÃO DE BALANÇO DE MASSA PARA O HIDROGÊNIO
* -----
*
* E11=((AK(5)*X(J)+AK(6)*X(J+Q)+AK(7)*X(J+6*Q))*X(J+2*Q)*PT**2)*X(J
* +9*Q)
*
* F(J+2*Q) = (-1/(ET*DR))*(-X(J+2*Q-1)+X(J+2*Q))-(1/(ET*A1))*E11
*
* -----
* EQUAÇÃO DE BALANÇO DE MASSA PARA O ETILBENZENO
* -----
*
* E12 = ((AK(8)*X(J+3*Q)+AK(9)*X(J+3*Q))*PT)*X(J+9*Q)
*
* F(J+3*Q) = (-1/(ET*DR))*(-X(J+3*Q-1)+X(J+3*Q))-(1/(ET*A1))*E12
*
* -----
* EQUAÇÃO DE BALANÇO DE MASSA PARA O TRIMETILBENZENO
* -----
*
* E13 = (AK(11)+AK(13)+AK(15))*X(J+4*Q)*X(J+5*Q)*PT**2
* E14 = (AK(10)*X(J)**2+AK(12)*X(J+Q)**2+
* AK(14)*X(J+6*Q)**2)*PT**2
* EC = (E13-E14)*X(J+9*Q)
*
* F(J+4*Q) = (-1/(ET*DR))*(-X(J+4*Q-1)+X(J+4*Q))-(1/(ET*A1))*EC
*
* -----
* EQUAÇÃO DE BALANÇO DE MASSA PARA O TOLUENO
* -----
*
* ED = EC+E5*X(J+9*Q)
*
* F(J+5*Q) = (-1/(ET*DR))*(-X(J+5*Q-1)+X(J+5*Q))-(1/(ET*A1))*ED
*
* -----
* EQUAÇÃO DE BALANÇO DE MASSA PARA O META-XILENO
* -----
*
* E18 = 1*((AK(2)+AK(3))*DKM*X(J+6*Q)-
* AK(1)*DKP*X(J)-AK(4)*DKO*X(J+Q))
* E20 = AK(7)*X(J+6*Q)*X(J+2*Q)*PT**2-0.47*AK(8)*X(J+3*Q)*PT
* E21 = (AK(14)*X(J+6*Q)**2-AK(15)*X(J+4*Q)*X(J+5*Q))*PT**2
* EE = (E18*E2+E20+E21-0.27*E5)*X(J+9*Q)
*
* F(J+6*Q) = (-1/(ET*DR))*(-X(J+6*Q-1)+X(J+6*Q))-(1/(ET*A1))*EE
*
* -----
* EQUAÇÃO DE BALANÇO DE MASSA PARA O CARBONO - COQUE
* -----
*
* F(J+8*Q) = (AK(17)*(X(J)+X(J+Q)+X(J+6*Q)))*X(J+9*Q)
*
* -----
* EQUAÇÃO DE BALANÇO DE ENERGIA
* -----
*
* E22 =(DHPPM)*AK(1)*DKP*X(J)*E2
* E23 =(DHPPM)*AK(2)*DKM*X(J+6*Q)*E2
* E24 =(DHOM)*AK(4)*DKO*X(J+Q)*E2
* E25 =(DHOM)*AK(3)*DKM*X(J+6*Q)*E2
*
* E26 =(DHPT)*AK(5)*X(J)*X(J+2*Q)*PT**2
* E27 =(DHPT)*AK(6)*X(J+Q)*X(J+2*Q)*PT**2
* E28 =(DHPT)*AK(7)*X(J+6*Q)*X(J+2*Q)*PT**2
* E29 =(DHEBO)*AK(8)*X(J+3*Q)*PT
* E30 =(DHEBO)*AK(9)*X(J+3*Q)*PT
* E31 =(DHPTB)*AK(10)*X(J)*PT**2
* E32 =(DHPTB)*AK(11)*X(J+4*Q)*X(J+5*Q)*PT**2

```

```

E33 =(DHPTB)*AK(12)*(X(J+Q)*PT)**2
E34 =(-DHPTB)*AK(13)*X(J+4*Q)*X(J+5*Q)*PT**2
E35 =(DHPTB)*AK(14)*(X(J+6*Q)*PT)**2
E36 =(-DHPTB)*AK(15)*X(J+4*Q)*X(J+5*Q)*PT**2
E37 =(-139.58)*0.12*E5
E38 =(510.29)*0.11*E5
E39 =(-193.84)*0.27*E5
*
EF = E22+E23+E24+E25+E26+E27+E28+E29+E30+E31+E32+E33+E34+E35+E36+
*E37+E38+E39
*
F(J+7*Q) = (-1/(ET*DR))*(-X(J+7*Q-1)+X(J+7*Q))-A3*EF
*
100 CONTINUE
RETURN
END
*
*****
*****
*
* SUBROTINA DE CONTAGEM DE TEMPO
*
*****
*
SUBROUTINE TEMPO (X)
*
* RETURN CURRENT TIME - MIDNIGHT - X
*
INTEGER*2 IHOURL,IMINUT,ISECON,IHUND
REAL*4 RHOURL,RMINUT,RSECON,RHUND
REAL*4 X1,X
*
CALL GETTIM (IHOURL,IMINUT,ISECON,IHUND)
RHOURL = FLOAT (IHOURL)
RMINUT = FLOAT (IMINUT)
RSECON = FLOAT (ISECON)
RHUND = FLOAT (IHUND)
X1 = RHOURL*3600.0+RMINUT*60.0+RSECON+RHUND/100.0
X = X1-X
RETURN
END

```

2. FORNO EM REGIME TRANSIENTE

```

*
*
SDEBUG
*****
*
*  MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UM FORNO USADO PARA AQUECIMENTO DA CORRENTE
*  DE REAGENTES DA ISOMERIZAÇÃO DE XILENOS.
*
*  O MODELO FOI REPRESENTADO POR UMA EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA:
*
*  EQUAÇÃO DO MODELO  $\frac{dT}{dt} = DT = (Q+FT*(HE-HS))/(RO*CP*V)$ 
*
*  NOMENCLATURA
*
*  DT - VARIAÇÃO DA TEMPERATURA DOS REAGENTES COM O TEMPO (K/s)
*  Q - CALOR RECEBIDO DA COMBUSTÃO (cal/s)
*  FT - VAZÃO MOLAR DOS REAGENTES (mol/s)
*  HE - ENTALPIA DOS REAGENTES NA ENTRADA DO FORNO (cal/mol)
*  HS - ENTALPIA DOS REAGENTES NA SAÍDA DO FORNO (cal/mol)
*  RO - MASSA ESPECÍFICA DOS REAGENTES (mol/cm3)
*  CP - CALOR ESPECÍFICO A PRESSÃO CONSTANTE (cal/mol.K)
*  V - VOLUME DA SERPENTINA DO FORNO (cm3)
*  H2HC - RELAÇÃO MOLAR HIDROGÊNIO/HIDROCARBONETO
*  X - TEMPERATURA EM CADA TEMPO (K)

```



```

*
*
*   O MODELO É RESOLVIDO PELO MÉTODO DE RUNGE-KUTTA-GILL
*
*
*****
*
*   PROGRAMA PRINCIPAL
*
*****
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMMON/BLOC1/ Q,HE,HS,FT,V,RO,CP,FMP,FMO,FMM,FMH,FMTL,FMTMB,FME
*      BZ
*
      REAL ITEMPO
*
      OPEN(UNIT=10,FILE='BDF3.DAD',STATUS='OLD')
      OPEN(UNIT=11,FILE='FORNO.DAT',STATUS='NEW')
*
      READ(10,*)FHC,H2HC,FC,V,RO,CP,QC,PASSO,FMP,FMO,FMM,FMTL,FMEBZ,F
*      MTMB,FMH,TSO,TEO,TAUMF,NPF,NPF1,DGF1,DGF2,DGF3
      WRITE(11,1)FHC,H2HC,FC,TEO,TSO
1    FORMAT(2X,5F12.4)
*
      ITEMPO = 0.0
      CALL TEMPO (ITEMPO)
*
      FH2 = FHC*H2HC
      FT = FHC + FH2
      Q = QC*FC
      X = TSO
      TE = TEO
*
*****
*   CÁLCULO DA TEMPERATURA DE SAÍDA
*****
*
      CONT = 1
      CONI = 1
      DO 10 TAU = 1,TAUMF
      TT = TAU*1.11644E-2
      IF(CONI.NE.NPF1) GOTO 11
      FT = FT*DGF1
      FC = FC*DGF2
      TE = TE*DGF3
      Q=QC*FC
      TT1 = TT
      TAU1 = TAU
      HT = 1.0
      GOTO 12
11    HE = FMP*(4290.0+(-5.993+1.443E-1*TE))+FMO*(4540.0+(-3.786+1.42
*      4E-1*TE))+FMM*(4120.0+(-6.966+1.504E-1*TE))+FMTL*(11950.0+(-5.817+
*      1.224E-1*TE))+FMEBZ*(7120.0+(-10.294+1.689E-1*TE))+FMTMB*(-3150.0+
*      (-2.484+1.536E-1*TE))+FMH*(6.483+2.215E-3*TE)
*
      CALL RKG (PASSO,X)
*      WRITE(*,*)Q,FT,HE,HS,X
*      PAUSE
      HT = 0.0
      IF(TAU.EQ.1.0)GOTO 12
      IF(CONI.NE.NPF) GOTO 13
*
12    TT = TT-TT1
      TAU2 = TAU-TAU1
      TT2 = TAU2/TAUMF
*
      WRITE(*,2)TT,X,TT2
      WRITE (11,2)TT,X,TT2
2    FORMAT (2X,F8.4,2X,F20.4,2X,F8.4)
*
      IF(HT.EQ.1.0) GOTO 11
      CONT = 0.0
13    CONT = CONT + 1

```

```

      CONI = CONI + 1
10  CONTINUE
      WRITE(*,3)CONI,TAU,TT1,NPF1
      WRITE(11,3)CONI,TAU,TT1,NPF1
3   FORMAT(/,2X,3F15.2,2X,I10)
*
      CALL TEMPO(ITEMP)
      WRITE(*,*)
      WRITE(*,*) 'TEMPO DE EXECUÇÃO =' ,ITEMP
*
*****
*   FINAL DO PROGRAMA PRINCIPAL
*****
*
      STOP
      END
*
*****
*   SUBROTINA RUNGE-KUTTA-GILL
*****
*
      SUBROUTINE RKG (PASSO,X)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
*
      DIMENSION C(4,1)
      CO = SQRT(2.0)
*
      Y = X
*
      CALL FUNC(X,F)
*
      C(1,1) = PASSO*F
      X = X + C(1,1)/2
*
      CALL FUNC(X,F)
*
      C(2,1) = PASSO*F
      X = Y + (CO - 1.0)*C(1,1)/2.0 + (2.0 - CO)*C(2,1)/2.0
*
      CALL FUNC(X,F)
*
      C(3,1) = PASSO*F
      X = Y - CO*C(2,1)/2.0 + (CO/2.0 + 1.0)*C(3,1)
*
      CALL FUNC(X,F)
*
      C(4,1) = PASSO*F
      X = Y + (C(1,1) + C(4,1))/6.0 + (2.0 - CO)*C(2,1)/6.0 + (CO/2.0
      *+ 1.0)*C(3,1)/3.0
*
      RETURN
      END
*
*****
*   SUBROTINA PARA O CÁLCULO DA FUNÇÃO
*****
*
      SUBROUTINE FUNC (X,F)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMMON/BLOC1/ Q,HE,HS,FT,V,RO,CP,FMP,FMO,FMM,FMH,FMTL,FMTMB,FME
      *BZ
*
      HS = FMP*(4290.0+(-5.993+1.443E-1*X))+FMO*(4540.0+(-3.786+1.424
      *E-1*X))+FMM*(4120.0+(-6.966+1.504E-1*X))+FMTL*(11950.0+(-5.817+1.2
      *24E-1*X))+FMEBZ*(7120.0+(-10.294+1.689E-1*X))+FMTMB*(-3150.0+(-2.4
      *84+1.536E-1*X))+FMH*(6.483+2.215E-3*X)
*
      F=(Q+FT*(HE-HS))/(RO*CP*V)
*
      RETURN
      END
*

```

```
*****
*   SUBROTINA DE CONTAGEM DE TEMPO
*****
*
  SUBROUTINE TEMPO (X)
*   RETURN CURRENT TIME - MIDNIGHT - X
*
  INTEGER*2 I HOUR, I MINUT, I SECON, I HUND
  REAL*4 R HOUR, R MINUT, R SECON, R HUND
  REAL*4 X1, X
*
  CALL GETTIM (I HOUR, I MINUT, I SECON, I HUND)
  R HOUR = FLOAT (I HOUR)
  R MINUT = FLOAT (I MINUT)
  R SECON = FLOAT (I SECON)
  R HUND = FLOAT (I HUND)
  X1 = R HOUR*3600.0+R MINUT*60.0+R SECON+R HUND/100.0
  X = X1-X
  RETURN
  END
```

ANEXO 2

DADOS PARA SIMULAÇÃO

1. DADOS PARA A SIMULAÇÃO DO REATOR.

Tabela 1. Constantes de Arrhenius e Energia de Ativação.

Parâmetros de Arrhenius	Reações	Constantes de Arrhenius (mol / g.atm.s)	Energia de Ativação (cal/mol)
K_1	para-xileno \longrightarrow meta-xileno	69,17	20000
K_{-1}	meta-xileno \longrightarrow para-xileno	206,67	22800
K_2	orto-xileno \longrightarrow meta-xileno	98,89	22300
K_{-2}	meta-xileno \longrightarrow orto-xileno	20,97	17400
K_3	p-xileno + H_2 \longrightarrow tolueno + metano	0,085	20000
K_4	o-xileno + H_2 \longrightarrow tolueno + metano	0,06	20000
K_5	m-xileno + H_2 \longrightarrow tolueno + metano	0,439	20000
K_6	EB \longrightarrow o,p e m-xileno	$1,4 \times 10^{-6}$	-110
K_{-6}	EB \longrightarrow tolueno + metano	45,83	20000
K_7	2 (p-xileno) \longrightarrow tolueno + TB	3,45	20000
K_{-7}	tolueno + TB \longrightarrow 2 (p-xileno)	20,67	22800
K_8	2 (o-xileno) \longrightarrow tolueno + TB	4,94	17400
K_{-8}	tolueno + TB \longrightarrow 2 (o-xileno)	9,89	22300
K_9	2 (m-xileno) \longrightarrow tolueno + TB	1,53	22500
K_{-9}	tolueno + TB \longrightarrow 2 (m-xileno)	15,3	22500
K_{10}	2 (tolueno) \longrightarrow xilenos + benzeno	0,55	5000

p, o, m, EB e TB referem-se aos compostos para-xileno, orto-xileno, meta-xileno, etilbenzeno e trimetilbenzeno, respectivamente. (Bahtia e colaboradores, 1989)

Tabela 2. Calor de reação a 298 K para as reações do sistema.

Reações			Calor de reação ΔH 298 K (cal/mol)
para-xileno	→	meta-xileno	+170,00
meta-xileno	→	para-xileno	-170,00
orto-xileno	→	meta-xileno	+420,00
meta-xileno	→	orto-xileno	-420,00
p-xileno + H ₂	→	tolueno + metano	-10256,07
o-xileno + H ₂	→	tolueno + metano	-10256,07
m-xileno + H ₂	→	tolueno + metano	-10256,07
EB	→	o, p e m-xileno	-2836,67
EB	→	tolueno + metano	-2836,67
2(p-xileno)	→	tolueno + TB	+530,00
tolueno + TB	→	2(p-xileno)	-530,00
2 (o-xileno)	→	tolueno + TB	+530,00
tolueno + TB	→	2 (o-xileno)	-530,00
2 (m-xileno)	→	tolueno + TB	+530,00
tolueno + TB	→	2 (m-xileno)	-530,00
2 (tolueno)	→	0,12 (p-xileno)	-139,58
2 (tolueno)	→	0,11 (o-xileno)	+510,29
2 (tolueno)	→	0,27 (m-xileno)	-193,84

p, o, m, EB e TB referem-se aos compostos para-xileno, orto-xileno, meta-xileno, etilbenzeno e trimetilbenzeno, respectivamente. (Bahtia e colaboradores, 1989).

Tabela 3. Constante de adsorção dos compostos na isomerização de xilenos.

Compostos da isomerização de xilenos	Constante de adsorção
PARA-XILENO	1,237
ORTO-XILENO	0,4767
META-XILENO	1,333

Bahtia e colaboradores, 1989.

Tabela 4. Propriedades e constantes utilizadas

Taxa de velocidade (G_0)	0,04849 (g/s.cm ²)
Peso molecular médio da mistura (PM)	22,2338 (g/mol)
Porosidade do leito catalítico (ε_L)	0,5
Massa específica da partícula (ρ)	0,588 (g/cm ³)
Raio interno do leito catalítico (R_I)	24,00 (cm)
Raio externo do leito catalítico (R_2)	129,70 (cm)
Capacidade calorífica P=cte. (C_p)	0,7915 (cal/g.K)
Constante universal dos gases (R)	1,987 (cal/ mol.K)
Temperatura máxima do material (TM)	1000 K

Dados industriais.

Tabela 5. Pressão parcial dos reagentes, na entrada do reator (atm).

Temperatura (K)	633	673
PARA-XILENO	0,0218	0,0485
ORTO-XILENO	0,2041	0,4535
HIDROGÊNIO	5,2263	11,6141
ETILBENZENO	0,0180	0,0399
TRIMETILBENZENO	0	0
TOLUENO	0,1979	0,4399
META-XILENO	0,7214	1,6030

Dados industriais.

2. DADOS PARA SIMULAÇÃO DO FORNO.

Tabela 6. Gás natural

Componentes	% Molar	$h_{f_i}^0$ (cal/mol)	PM (g/mol)
Metano (CH_4)	79,50	-17890	16,04
Etano (C_2H_6)	10,66	-20240	30,07
Propano (C_3H_8)	5,99	-24820	44,09
Butano (C_4H_{10})	2,08	-30150	58,12
Pentano (C_5H_{12})	1,77	-35000	72,15

$h_{f_i}^0$ dados de Reid e colaboradores, 1977.

Tabela 7. Fluido de processo

Componentes	% Molar	C_P (cal/mol . K)	$h_{f,i}^0$ (cal/mol)	PM (g/mol)
Para - xileno	0,34	$-5,993 + 1,443 \times 10^{-1} T$	4290,0	106,168
Orto – xileno	3,19	$-3,786 + 1,424 \times 10^{-1} T$	4540,0	106,168
Meta – xileno	11,29	$-6,966 + 1,504 \times 10^{-1} T$	4120,0	106,168
Hidrogênio	81,8	$-6,483 + 2,215 \times 10^{-1} T$	0,0	2,016
Etil-benzeno	0,28	$-10,294 + 1,689 \times 10^{-1} T$	7120,0	106,168
Trimetil-benzeno	0,00	$-2,484 + 1,536 \times 10^{-1} T$	-3150,0	120,195
Tolueno	3,10	$-5,817 + 1,224 \times 10^{-1} T$	11950,0	92,141

Reid e colaboradores, 1977.

Tabela 8. Dados do processo

Temperatura da corrente de entrada	591K
Pressão da corrente de entrada	15 atm.
Vazão molar de xilenos de entrada	180,1142 moles/l
Relação H_2 / HC na entrada	4,5 : 1
Volume da tubulação aquecida	$4,278 \times 10^6 \text{ cm}^3$
Temperatura dos gases de combustão	1030 K

Dados industriais.

ANEXO 3

MODELO DE CONVOLUÇÃO

1. MODELO DE CONVOLUÇÃO PARA O REATOR

```

*****
*
*   PROGRAMA PRINCIPAL
*
*****
*
*   IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
*
*
*   DOUBLE PRECISION X(5000),Y(5000),Z(5000),U(10000),V(5000),AI(100)
*   *,HI(100)
*
*
*   READ (6,*) GO,PM,EBL,ET,ROP,R1,R2,CP
*   READ (6,*) DKP,DKM,DKO
*   READ (6,*) DHPM,DHOM,DHPT,DHEBO,DHPTB,DHTOP
*   READ (9,*) PT,P,KM,PASSO,TAUM,NP,DG1,DG2,DG3,DG4,DG5,DG6,DG7,NP1,
*   *,NP2,NP3
*
*
*
*   KK=1
*   DO 50 L=1,K-1
*   IF(L.LT.NP2) GOTO 50
*   IF(L.GT.NP2) GOTO 55
*   AII=U(8*KM+L)
*   AI(KK)=U(L+8*KM)-AII
*   HI(KK)=AI(KK)
*   GOTO 50
55 IF(L.GT.NP3) GOTO 50
*   KK=KK+1
*   AI(KK)=U(8*KM+L)-AII
*   KN=KK-1
*   HI(KK)=AI(KK)-AI(KN)
50 CONTINUE
*
*
*   WRITE(8,36)
36  FORMAT(/,2X,'INTERVALO',10X,'ai',15X,'hi')
*   DO 28 KK=1,N
*   WRITE(8,37)KK,AI(KK),HI(KK),AII
37  FORMAT(4X,I3,2X,2E20.10,2X,F15.10)
28  CONTINUE
*
*

```

Coefficientes do modelo de convolução do reator para horizonte do modelo igual a 70 com intervalo de amostragem de 1,0s.

Intervalo	hi	Intervalo	hi
1	.0000000000E+00	36	.5721484423E-04
2	.9660328093E-13	37	.6771546797E-04
3	.1023174601E-12	38	.7621961663E-04
4	.9804657086E-13	39	.8168272554E-04
5	.4802061526E-13	40	.8341716215E-04
6	.2337019467E-13	41	.8122847549E-04
7	.1128611093E-13	42	.7544391529E-04
8	.5415806692E-14	43	.6682884125E-04
9	.2570860191E-14	44	.5641968889E-04
10	.1210836986E-14	45	.4532319979E-04
11	.5759281940E-15	46	.3453415530E-04
12	.2775557562E-15	47	.2480962509E-04
13	.1665334537E-15	48	.1661483506E-04
14	.6106226635E-15	49	.1013390880E-04
15	.9353628982E-14	50	.5324837225E-05
16	.1222771884E-12	51	.1994090254E-05
17	.1222570656E-11	52	.1298302758E-06
18	.9642456972E-11	53	.1336882373E-05
19	.6176453099E-10	54	.1895132488E-05
20	.3292150649E-09	55	.2028827385E-05
21	.1490132861E-08	56	.1910962416E-05
22	.5826514892E-08	57	.1665465992E-05
23	.1996889348E-07	58	.1374587344E-05
24	.6074048521E-07	59	.1088180252E-05
25	.1657498708E-06	60	.8327732965E-06
26	.4095687640E-06	61	.6193183914E-06
27	.9238871624E-06	62	.4492180068E-06
28	.1915999368E-05	63	.3186632293E-06
29	.3675582088E-05	64	.2215326081E-06
30	.6557396196E-05	65	.1511763723E-06
31	.1092997338E-04	66	.1014018519E-06
32	.1708899771E-04	67	.6692689805E-07
33	.2514777979E-04	68	.4350631672E-07
34	.3493168530E-04	69	.2787718470E-07
35	.4591232288E-04	70	.1761956730E-07

2. MODELO DE CONVOLUÇÃO PARA O FORNO

```

*****
*
*  PROGRAMA PRINCIPAL
*
*****
  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
  DOUBLE PRECISION U(500),AI(100),HI(100)
  COMMON/BLOC1/ Q,HE,HS,FT,V,RO,CP,FMP,FMO,FMM,FMH,FMTL,FMTMB,FME
  *BZ
*
  REAL ITEMP
*
  OPEN(UNIT=10,FILE='BDF3M.DAD',STATUS='OLD')
  OPEN(UNIT=11,FILE='FORNO.DAT',STATUS='NEW')
*
  READ(10,*)FHC,H2HC,FC,V,RO,CP,QC,PASSO,FMP,FMO,FMM,FMTL,FMEBZ,F
  *MTMB,FMH,TSO,TEO,TAUMF,NPF,NPF1,DGF1,DGF2,DGF3,TM,N,NP2,NP3
  WRITE(11,1)FHC,H2HC,FC,TEO,TSO
1  FORMAT(2X,5F12.4)
*
  ITEMP = 0.0
  CALL TEMPO (ITEMP)
.
.
K=L
  KK=1
  DO 50 L=1,K-1
    IF(L.LT.NP2) GOTO 50
    IF(L.GT.NP2) GOTO 55
    AII=U(L)
    AI(KK)=U(L)-AII
    HI(KK)=AI(KK)
    GOTO 50
55  IF(L.GT.NP3) GOTO 50
    KK=KK+1
    AI(KK)=U(L)-AII
    KN=KK-1
    HI(KK)=AI(KK)-AI(KN)
50  CONTINUE
.
.
  WRITE(11,36)
36  FORMAT(/,2X,'INTERVALO',10X,'ai',15X,'hi')
    DO 28 KK=1,N
      WRITE(11,37)KK,AI(KK),HI(KK),AII
37  FORMAT(4X,I3,2X,2E20.10,2X,F15.10)
28  CONTINUE

```

Coefficientes do modelo de convolução do forno para horizonte do modelo igual a 70 com intervalo de amostragem de 10,0s.

Intervalo	hi	Intervalo	hi
1	.0000000000E+00	36	.1609043448E-04
2	.3463512770E-04	37	.1391912656E-04
3	.1923573383E-02	38	.1204082366E-04
4	.1663998657E-02	39	.1041598651E-04
5	.1439451988E-02	40	.9010411413E-05
6	.1245206550E-02	41	.7794510272E-05
7	.1077173372E-02	42	.6742687717E-05
8	.9318152663E-03	43	.5832802329E-05
9	.8060723680E-03	44	.5045700532E-05
10	.6972977220E-03	45	.4364813417E-05
11	.6032015640E-03	46	.3775807948E-05
12	.5218031198E-03	47	.3266285243E-05
13	.4513889090E-03	48	.2825519578E-05
14	.3904766748E-03	49	.2444232611E-05
15	.3377841825E-03	50	.2114398034E-05
16	.2922022269E-03	51	.1829072662E-05
17	.2527712836E-03	52	.1582250243E-05
18	.2186613104E-03	53	.1368735034E-05
19	.1891542740E-03	54	.1184032425E-05
20	.1636290358E-03	55	.1024254330E-05
21	.1415482759E-03	56	.8860373311E-06
22	.1224471824E-03	57	.7664718932E-06
23	.1059236674E-03	58	.6630410940E-06
24	.9162990183E-04	59	.5735676630E-06
25	.7926499449E-04	60	.4961681371E-06
26	.6856865746E-04	61	.4292132133E-06
27	.5931572715E-04	62	.3712934566E-06
28	.5131142445E-04	63	.3211896246E-06
29	.4438725455E-04	64	.2778470046E-06
30	.3839745996E-04	65	.2403532146E-06
31	.3321595234E-04	66	.2079189829E-06
32	.2873365819E-04	67	.1798615630E-06
33	.2485622284E-04	68	.1555903212E-06
34	.2150202420E-04	69	.1345943359E-06
35	.1860045460E-04	70	.1164316347E-06

ANEXO 4

SUBROTINAS DE CÁLCULO DOS CONTROLADORES

1. SUBROTINAS PARA O REATOR

1.1 Cálculo do controlador IMC

```

•
•
  READ (6,*) GO,PM,EBL,ET,ROP,R1,R2,CP
  READ (6,*) DKP,DKM,DKO
  READ (6,*) DHPM,DHOM,DHPT,DHEBO,DHPTB,DHTOP
  READ (9,*) PT,P,KM,PASSO,TAUM,NP,NP1,PXM,NFL,DG1,DG2,DG3,DG4,DG5,
  *DG6,DG7,FE,NP2,TETAD,TAUP,TKP,ALFA,NN
•
•
4  IF(CONLINE.PXM)GOTO 11
   HT=1.0
   TT1=TT
   TAU1=TAU
   CONT=0
   CONTA=0
   SPO=X(Q)
   SP=FE*SPO
   K=1
   GOTO 12
11 IF(CONL.LT.PXM)GOTO 5
   IF(CONTA.NE.NP1)GOTO 5
   CONTA=0
   CALL AIMC(SP,X,FMN)
•
•
*-----
*   CÁLCULO DO CONTROLADOR - IMC
*-----
  SUBROUTINE AIMC (SP,X,FMN)
  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
•
  COMMON/BLOC7/ PT,DR,TETAD,TAUP,TKP,DELTAT
  COMMON/BLOC9/ BK,EA,R,RR,TM,AA,ALFA,NN
•
  IF(K.NE.1) GOTO 70
  FMN=X(7*Q+1)
  FMN1=X(7*Q+1)
  FMN2=X(7*Q+1)
  FMN3=X(7*Q+1)
  FMN4=X(7*Q+1)
  YN=X(Q)
  DELTAT=TETAD/NN
  AA=DEXP(-DELTAT/TAUP)
•
70 FMN4=FMN3
   FMN3=FMN2
   FMN2=FMN1
   FMN1=FMN
   YN1=YN
   EN1=EN
   YN=AA*YN1+(1-AA)*TKP*FMN4
   EN=SP-(X(Q)-YN)
   FMN=ALFA*FMN1+((EN-AA*EN1)*(1-ALFA)/((1-AA)*TKP))
   TC=FMN*TM
   X(7*Q+1)=FMN
   DO 14 I=1,1
14 X(I+7*Q)=X(7*Q+1)
   K=K+1
   RETURN
   END
•
*-----
•
•

```


1.2 Cálculo do controlador IMC com Preditor Analítico Generalizado

```

•
•
  READ (6,*) GO,PM,EBL,ET,ROP,R1,R2,CP
  READ (6,*) DKP,DKM,DKO
  READ (6,*) DHPM,DHOM,DHPT,DHEBO,DHPTB,DHTOP
  READ (9,*) PT,P,KM,PASSO,TAUM,NP,NP1,PXM,NFL,DG1,DG2,DG3,DG4,DG5,
  *DG6,DG7,FE,NP2,TETAD,TAUP,TKP,ALFA,NN,BETA
•
•
4  IF(CONI.NE.PXM)GOTO 11
   HT=1.0
   TT1=TT
   TAU1=TAU
   CONT=0
   CONTA=0
   SPO=X(Q)
   SP=FE*SPO
   K=1
   GOTO 12
11 IF(CONILT.PXM)GOTO 5
   IF(CONTA.NE.NP1)GOTO 5
   CONTA=0
   CALL AIMCP (SP,X,FMN)
•
•
*-----
*   CÁLCULO DO CONTROLADOR - IMC COM PREDITOR GAP
*-----
  SUBROUTINE AIMCP (SP,X,FMN)
  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
•
  COMMON/BLOC7/ PT,DR,TETAD,TAUP,TKP,DELTAT
  COMMON/BLOC9/ BK,EA,R,RR,TM,AA,ALFA,NN,BETA
•
  IF(K.NE.1) GOTO 70
  FMN=X(7*Q+1)
  FMN1=X(7*Q+1)
  FMN2=X(7*Q+1)
  FMN3=X(7*Q+1)
  FMN4=X(7*Q+1)
  YN=X(Q)
  DELTAT=TETAD/NN
  AA=DEXP(-DELTAT/TAUP)
  AAN=DEXP(-DELTAT)
  CC=(1-AAN**NN)*(1-BETA)/(1-AAN)
•
70 FMN4=FMN3
   FMN3=FMN2
   FMN2=FMN1
   FMN1=FMN
   YN1=YN
   DN1=DN
   DNN1=DNN
   EN1=EN
   YN=AA*YN1+(1-AA)*TKP*FMN4
   DN=X(Q)-YN
   DNN=BETA*DNN1+(AAN**NN+CC)*DN-(AAN**NN*BETA+AAN*CC)*DN1
   EN=SP-DNN
   FMN=ALFA*FMN1+((EN-AA*EN1)*(1-ALFA)/((1-AA)*TKP))
   TC=FMN*TM
   X(7*Q+1)=FMN
   DO 14 I=1,I
14  X(I+7*Q)=X(7*Q+1)
   K=K+1
   RETURN
   END
•
*-----
•
•

```

1.3. Cálculo do controlador IMC Preditivo

```

•
•
  READ (6,*) GO,PM,EBL,ET,ROP,R1,R2,CP
  READ (6,*) DKP,DKM,DKO
  READ (6,*) DHPM,DHOM,DHPT,DHEBO,DHPTB,DHTOP
  READ (9,*) PT,P,KM,PASSO,TAUM,NPT,NP1,PXM,NFI,DG1,DG2,DG3,DG4,DG5
  *,DG6,DG7,FE,NP2,TE,ALFAF,GA,BE,NN,NP,NM,PASS
•
•
DO 40 J=1,NN
  READ (8,*) HI(1,J)
  WRITE(10,*)'HI',1,J,'=',HI(1,J)
40 CONTINUE
*
  DO 95 J=1,NP
    GAMA(1,J)=GA
  *   WRITE(10,*)'GAMA',1,J,'=',GAMA(1,J)
95 CONTINUE
*
  DO 96 J=1,NM
    BETA(1,J)=BE
  *   WRITE(10,*)'BETA',1,J,'=',BETA(1,J)
96 CONTINUE
•
•
4  IF(CONI.NE.PXM)GOTO 11
  HT=1.0
  NV=0
  KV=1
  TT1=TT
  TAU1=TAU
  CONT=0
  CONTA=0
  SPO1=Y(Q)
  SPO=X(Q)
  SP=FE*SPO
  FMM=X(7*Q+1)
  TC=TE
  DO 41 I=1,NN-1
41  VV(I,1)=0.0
    GOTO 12
11  IF(CONILT.PXM)GOTO 5
    IF(CONTA.NE.NP1)GOTO 5
    CONTA=0
    SPA=X(Q)
    CALL AIMCPR(SPA,SP,FMM)
    TC=TC+FMM
  *   WRITE(10,*)'TC=' ,TC
    X(7*Q+1)=TC/TMX
    DO 14 I=1,1
      X(I+7*Q)=X(7*Q+1)
  *   WRITE(10,*)'X(I+7*Q)=' ,X(I+7*Q)
14 CONTINUE
*
•
•
*****
*   SUBROTINA PARA O CÁLCULO DO CONTROLADOR - IMC PREDITIVO
*
*****
*   N = HORIZONTE DO MODELO
*   P = HORIZONTE DE PREDIÇÃO
*   M = HORIZONTE DE CONTROLE
*-----
*
  SUBROUTINE AIMCPR (SPA,SP,FMM)
  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
*
  DOUBLE PRECISION TM(200,200),TMT(200,200),AA(200,100)
  DOUBLE PRECISION AAT(100,200),RP(100,200),RPT(200,100)

```

```

DOUBLE PRECISION TP(200,200),TPT(200,200),TMA(100,200)
DOUBLE PRECISION BM(100,100),AIP(100,100),AIM(100,100)
DOUBLE PRECISION HN(200,200),AIPO(100,100),OMEGA(100,100)
DOUBLE PRECISION ARP(100,100),TP2(100,100),RTP2(100,100)
DOUBLE PRECISION P2R(100,200),RA(100,100),ATM(100,100)
DOUBLE PRECISION BM2(100,100),ABM(100,100),AINV(100,100)
DOUBLE PRECISION BTA(1,100),BAT(1,200),BTM(1,100)
DOUBLE PRECISION BRP(1,100),BT(100,100),STP(100,100)
DOUBLE PRECISION SOG(100,100),TPO(100,100),POV(100,100)
DOUBLE PRECISION TOV(100,100),EV(100,100),EP(100,1)
DOUBLE PRECISION SS(1,100),E(100,1),AB(100,100)
DOUBLE PRECISION HI(1,200),VV(100,1),VVI(100,1)
DOUBLE PRECISION GAMA(1,100),BETA(1,100),FMMC(10,10)
*
COMMON/BLOC11/ NN,NP,NM
COMMON/BLOC12/ ALFAF,GA,BE
COMMON/BLOC13/ GAMA,BETA,HI,VV
COMMON/BLOC14/ AIPO,HN,OMEGA,TP,TPT,RP,RPT,TM,TMT,AA,AAT
COMMON/BLOC15/ ARP,RTP2,P2R,TMA,RA,TP2
COMMON/BLOC16/ BTA,BTM,BAT,BRP,BT,SS,BM
COMMON/BLOC17/ STP,SOG,TPO,POV,EV,BM2,ATM,ABM,EP,TOV
COMMON/BLOC18/ NV,KV
*
COMMON/BLOC19/ A2,A2T,AO,B,C,A1,B1,C1,AAB,GA,DIG,DIT
*
COMMON/BLOC20/ N,N1,N2,N3,N4,N5,N6,N7,N8,N9
*
*   WRITE(10,*)'INSTANTE DE AMOSTRAGEM (K) =' ,KV
*
*-----
*   CÁLCULO DO VETOR DE ERROS FUTUROS
*-----
YR=SPA
DO 151 I=1,NP
  E(I,1)=(1-ALFAF)*(SP-YR)
*   WRITE(10,*)'ERROS FUT',I,'=',E(I,1)
151 CONTINUE
*
*-----
*   MONTAGEM DAS MATRIZES DIAGONAL TP E BM
*-----
IF(KV.NE.1) GOTO 1000
*   CALL DIAGN(GAMA,TP,NP)
  CALL DIAGN(BETA,BM,NM)
DO 500 I=1,NP
DO 500 J=1,NP
  TP(I,J)=0.0
  IF(J.EQ.I)TP(I,J)=GAMA(1,J)
*   WRITE(10,*)'TP',I,J,'=',TP(I,J)
500 CONTINUE
DO 501 I=1,NM
DO 501 J=1,NM
*   WRITE(10,*)'BM',I,J,'=',BM(I,J)
501 CONTINUE
*
*-----
*   MONTAGEM DAS MATRIZES IDENTIDADE IP E IM
*-----
NA=NN-1
CALL MIDENT(AIP,NP)
CALL MIDENT(AIM,NM)
*   CALL MIDENT(AIN,NA)
DO 502 I=1,NP
DO 502 J=1,NP
*   WRITE(10,*)'IP',I,J,'=',AIP(I,J)
502 CONTINUE
DO 503 I=1,NM
DO 503 J=1,NM
*   WRITE(10,*)'IM',I,J,'=',AIM(I,J)
503 CONTINUE
*
*-----
*   MONTAGEM DA MATRIZ TRIANGULAR HN
*-----
DO 53 I=1,NN-1

```

```

DO 52 J=1,NN-1
HN(I,J)=0.0
HN(I,J)=HI(1,I+J)
WRITE(*,*)HN',I,J,'=',HN(I,J)
*   WRITE(10,*)HN',I,J,'=',HN(I,J)
52 CONTINUE
53 CONTINUE
*
*-----
*   MONTAGEM DAS MATRIZES AUMENTADAS IPO E RP
*-----
DO 54 I=1,NP
DO 55 J=1,NP
AIPO(I,J)=AIP(I,J)
RP(I,J)=AIP(I,J)
55 CONTINUE
DO 56 J=NP+1,NN-1
AIPO(I,J)=0.0
56 CONTINUE
DO 57 J=NP+1,2*NN-1
RP(I,J)=0.0
57 CONTINUE
54 CONTINUE
*   DO 510 I=1,NP
*   DO 510 J=1,NN-1
* 510 WRITE(10,*)IPO',I,J,'=',AIPO(I,J)
*   DO 511 I=1,NP
*   DO 511 J=1,2*NN-1
* 511 WRITE(10,*)RP',I,J,'=',RP(I,J)
*
*-----
*   MONTAGEM DA MATRIZ AUMENTADA TM
*-----
DO 58 I=1,NN
DO 59 J=1,NM
IF(I.LE.NM)THEN
TM(I,J)=AIM(I,J)
ELSE
TM(I,J)=0.0
TM(I,NM)=1.0
END IF
*   WRITE(10,*)TM',I,J,'=',TM(I,J)
59 CONTINUE
58 CONTINUE
*
*-----
*   MONTAGEM DO VETOR BT
*-----
DO 60 J=1,NM
BT(1,J)=0.0
IF(J.EQ.1)BT(1,J)=1.0
WRITE(*,*)BT',1,J,'=',BT(1,J)
*   WRITE(10,*)BT',1,J,'=',BT(1,J)
60 CONTINUE
*
*-----
*   MONTAGEM DA MATRIZ DE COEFICIENTES AA
*-----
DO 61 I=1,NN
AA(I,1)=HI(1,I)
DO 62 J=2,NN
AA(I,J)=0.0
IF(J.LE.I)AA(I,J)=HI(1,I-J+1)
62 CONTINUE
61 CONTINUE
DO 109 I=1,NN-2
DO 98 J=1,NN-2
AB(I,J)=0.0
IF(J.GE.I)AB(I,J)=HI(1,NN+I-J)
98 CONTINUE
109 CONTINUE
KX=2
DO 63 I=NN+1,2*NN-1

```

```

      AA(I,1)=0.0
      DO 64 K=1,KX
        AK=AK+HI(1,K)
64    CONTINUE
      AA(L,NN)=AK
      KX=KX+1
      AK=0.0
      DO 65 J=2,NN-1
        AA(L,J)=AB(I-NN,J-1)
        AA(2*NN-1,J)=0.0
65    CONTINUE
63    CONTINUE
      DO 66 I=1,2*NN-1
        DO 67 J=1,NN
          WRITE(*,*)'AA',I,J,'=',AA(I,J)
*      WRITE(10,*)'AA',I,J,'=',AA(I,J)
67    CONTINUE
66    CONTINUE
*
*-----
*  MONTAGEM DA MATRIZ OMEGA
*-----
      NA=NN-1
*      CALL MULT(AIPO,HN,OMEGA,NN,NM,NP)
      DO 505 I=1,NP
        DO 506 J=1,NN-1
          OMEGA(I,J)=0.0
          DO 600 K=1,NA
            OMEGA(I,J)=OMEGA(I,J)+AIPO(I,K)*HN(K,J)
*          WRITE(10,*)'AIPO',I,J,'=',AIPO(I,J)
*          WRITE(10,*)'OMEGA',I,J,'=',OMEGA(I,J)
506    CONTINUE
505    CONTINUE
*
*-----
*  CÁLCULO DO QUADRADO DAS MATRIZES TAUP E BM
*-----
*      N1=NP
*      N2=NP
*      N3=NP
*      CALL MULT(TP,TP,TP2,NP,NP,NP)
*      CALL MULT(BM,BM,BM2,NM,NM,NM)
      DO 508 I=1,NP
        DO 507 J=1,NP
          TP2(I,J)=0.0
          DO 620 K=1,NP
            TP2(I,J)=TP2(I,J)+TP(I,K)*TP(K,J)
*          WRITE(10,*)'TP2',I,J,'=',TP2(I,J)
507    CONTINUE
508    CONTINUE
        DO 621 I=1,NM
          DO 622 J=1,NM
            BM2(I,J)=0.0
            DO 624 K=1,NM
              BM2(I,J)=BM2(I,J)+BM(I,K)*BM(K,J)
*              WRITE(10,*)'BM2',I,J,'=',BM2(I,J)
622    CONTINUE
621    CONTINUE
*
*-----
*  CÁLCULO DAS MATRIZES TRANSPOSTAS
*-----
      NR=2*NN-1
      CALL TRANS(TM,TMT,NM,NN)
*      CALL TRANS(AA,AAT,NN,NR)
      DO 608 I=1,NN
        DO 607 J=1,NR
          AAT(I,J)=AA(J,I)
*          WRITE(10,*)'AAT',I,J,'=',AAT(I,J)
607    CONTINUE
608    CONTINUE
*      CALL TRANS(RP,RPT,NR,NP)
      CALL TRANS(TP,TPT,NP,NP)

```

```

DO 618 I=1,NR
DO 617 J=1,NP
RPT(L,J)=RP(J,I)
* WRITE(10,*)'RPT',L,J,'=',RPT(L,J)
617 CONTINUE
618 CONTINUE
*
*-----
* CÁLCULO DO VETOR SS
*-----
* N1=NM
* N2=NR
* N3=NN
* CALL MULT(TMT,AAT,TMA,NM,NR,NN)
DO 625 I=1,NM
DO 625 J=1,2*NN-1
TMA(L,J)=0
DO 627 K=1,NN
627 TMA(L,J)=TMA(L,J)+TMT(I,K)*AAT(K,J)
* WRITE(10,*)'TMA',L,J,'=',TMA(L,J)
625 CONTINUE
* CALL MULT(TMA,RPT,ARP,NM,NP,NR)
DO 301 I=1,NM
DO 301 J=1,NP
ARP(L,J)=0
DO 302 K=1,2*NN-1
302 ARP(L,J)=ARP(L,J)+TMA(I,K)*RPT(K,J)
* WRITE(10,*)'ARP',L,J,'=',ARP(L,J)
301 CONTINUE
* CALL MULT(ARP,TP2,RTP2,NM,NP,NP)
DO 303 I=1,NM
DO 303 J=1,NP
RTP2(L,J)=0
DO 304 K=1,NP
304 RTP2(L,J)=RTP2(L,J)+ARP(I,K)*TP2(K,J)
* WRITE(10,*)'RTP2',L,J,'=',RTP2(L,J)
303 CONTINUE
* CALL MULT(RTP2,RP,P2R,NM,NR,NP)
DO 305 I=1,NM
DO 305 J=1,2*NN-1
P2R(L,J)=0
DO 306 K=1,NP
306 P2R(L,J)=P2R(L,J)+RTP2(I,K)*RP(K,J)
* WRITE(10,*)'P2R',L,J,'=',P2R(L,J)
305 CONTINUE
* CALL MULT(P2R,AA,RA,NM,NN,NR)
DO 307 I=1,NM
DO 307 J=1,NN
RA(L,J)=0
DO 308 K=1,2*NN-1
308 RA(L,J)=RA(L,J)+P2R(I,K)*AA(K,J)
* WRITE(10,*)'RA',L,J,'=',RA(L,J)
307 CONTINUE
* CALL MULT(RA,TM,ATM,NM,NM,NN)
DO 309 I=1,NM
DO 309 J=1,NM
ATM(L,J)=0
DO 310 K=1,NN
310 ATM(L,J)=ATM(L,J)+RA(I,K)*TM(K,J)
* WRITE(10,*)'ATM',L,J,'=',ATM(L,J)
309 CONTINUE
* CALL SOMA(ATM,BM2,ABM,NM,NM)
DO 330 I=1,NM
DO 330 J=1,NM
ABM(L,J)=ATM(L,J)+BM2(L,J)
* WRITE(10,*)'ABM',L,J,'=',ABM(L,J)
330 CONTINUE
CALL MINV(ABM,AINV,NM)
DO 331 I=1,NM
DO 331 J=1,NM
* WRITE(10,*)'INVERSA - AINV',L,J,'=',AINV(L,J)
331 CONTINUE
* CALL MULT(BT,AINV,BTA,1,NM,NM)

```

```

DO 311 I=1,1
DO 311 J=1,NM
BTA(I,J)=0.0
DO 312 K=1,NM
312 BTA(I,J)=BTA(I,J)+BT(L,K)*AINV(K,J)
* WRITE(10,*)'BTA',I,J,'=',BTA(I,J)
311 CONTINUE
* CALL MULT(BTA,TMT,BTM,1,NN,NM)
DO 313 I=1,1
DO 313 J=1,NN
BTM(I,J)=0
DO 314 K=1,NM
314 BTM(I,J)=BTM(I,J)+BTA(I,K)*TMT(K,J)
* WRITE(10,*)'BTM',I,J,'=',BTM(I,J)
313 CONTINUE
* CALL MULT(BTM,AAT,BAT,1,NR,NN)
DO 315 I=1,1
DO 315 J=1,2*NN-1
BAT(I,J)=0
DO 316 K=1,NN
316 BAT(I,J)=BAT(I,J)+BTM(I,K)*AAT(K,J)
* WRITE(10,*)'BAT',I,J,'=',BAT(I,J)
315 CONTINUE
* CALL MULT(BAT,RPT,BRP,1,NP,NR)
DO 317 I=1,1
DO 317 J=1,NP
BRP(I,J)=0
DO 318 K=1,2*NN-1
318 BRP(I,J)=BRP(I,J)+BAT(I,K)*RPT(K,J)
* WRITE(10,*)'BRP',I,J,'=',BRP(I,J)
317 CONTINUE
* CALL MULT(BRP,TPT,SS,1,NP,NP)
DO 319 I=1,1
DO 319 J=1,NP
SS(I,J)=0
DO 320 K=1,NP
320 SS(I,J)=SS(I,J)+BRP(I,K)*TPT(K,J)
* WRITE(10,*)'VETOR S',I,J,'=',SS(I,J)
319 CONTINUE
* DO 68 J=1,NP
* WRITE(*,*)'VETOR S',I,J,'=',SS(1,J)
* WRITE(10,*)'VETOR S',1,J,'=',SS(1,J)
* 68 CONTINUE
*
* -----
* CÁLCULO DOS VALORES DE GI, SI E HH
* -----
* CALL MULT(SS,TP,STP,1,NP,NP)
DO 321 I=1,1
DO 321 J=1,NP
STP(I,J)=0
DO 322 K=1,NP
322 STP(I,J)=STP(I,J)+SS(I,K)*TP(K,J)
* WRITE(10,*)'STP',I,J,'=',STP(I,J)
321 CONTINUE
* CALL MULT(STP,OMEGA,SOG,1,NA,NP)
DO 323 I=1,1
DO 323 J=1,NN-1
SOG(I,J)=0
DO 324 K=1,NP
324 SOG(I,J)=SOG(I,J)+STP(I,K)*OMEGA(K,J)
* WRITE(10,*)'SOG',I,J,'=',SOG(I,J)
323 CONTINUE
DO 69 J=1,NP
SI=SI+STP(1,J)
69 CONTINUE
DO 70 J=1,NN-1
GI=GI+SOG(1,J)
70 CONTINUE
DO 91 J=1,NN
HH=HH+HI(1,J)
91 CONTINUE
WRITE(*,*)'SI=',SI

```

```

WRITE(10,*)SI='SI
WRITE(*,*)GI='GI
WRITE(10,*)GI='GI
WRITE(*,*)HH='HH
WRITE(10,*)HH='HH
*-----
*   CÁLCULO DO COMPENSADOR DE OFFSET
*-----
FOF=(1+GI)/(SI*HH)
WRITE(10,*)COMPENSADOR DE OFFSET='FOF
*-----
*   CÁLCULO DA MATRIZ TPO
*-----
*   CALL MULT(TP,OMEGA,TPO,NP,NA,NP)
DO 325 I=1,NP
DO 325 J=1,NN-1
TPO(I,J)=0
DO 326 K=1,NP
326 TPO(I,J)=TPO(I,J)+TP(I,K)*OMEGA(K,J)
*   WRITE(10,*)TPO',I,J,'=',TPO(I,J)
325 CONTINUE
*-----
*   CÁLCULO DOS ERROS FUTUROS CORRIGIDOS
*-----
1000 DO 92 I=1,NP
EP(I,1)=FOF*E(I,1)
*   WRITE(10,*)EP',I,1,'=',EP(I,1)
92 CONTINUE
*-----
*   CÁLCULO DA AÇÃO DE CONTROLE m(K)
*-----
*   CALL MULT(TPO,VV,POV,NP,1,NA)
DO 327 I=1,NP
DO 327 J=1,1
POV(I,J)=0
DO 328 K=1,NN-1
328 POV(I,J)=POV(I,J)+TPO(I,K)*VV(K,J)
*   WRITE(10,*)POV',I,J,'=',POV(I,J)
327 CONTINUE
DO 71 I=1,NP
TOV(I,1)=-POV(I,1)
*   WRITE(10,*)TOV',I,1,'=',TOV(I,1)
71 CONTINUE
*   CALL SOMA(EP,TOV,EV,NP,1)
DO 332 I=1,NP
DO 332 J=1,1
EV(I,J)=EP(I,J)+TOV(I,J)
*   EV(I,J)=EP(I,J)
*   WRITE(10,*)EV',I,J,'=',EV(I,J)
332 CONTINUE
*   CALL MULT(SS,EV,FMMC,1,1,NP)
DO 333 I=1,1
DO 333 J=1,1
FMMC(I,J)=0.0
DO 334 K=1,NP
334 FMMC(I,J)=FMMC(I,J)+SS(I,K)*EV(K,J)
FMM=FMMC(1,1)
333 CONTINUE
*   WRITE(*,*)AÇÃO DE CONTROLE ='FMM
*   WRITE(10,*)AÇÃO DE CONTROLE ='FMM
*-----
*   MONTAGEM DO VETOR DAS AÇÕES DE CONTROLE PASSADAS - VV(K-1)
*-----
VV1(1,1)=FMMC(1,1)
DO 95 I=2,NN-1
95 VV1(I,1)=VV(I-1,1)
DO 96 I=1,NN-1
VV(I,1)=VV1(I,1)
*   WRITE(10,*)VETOR AÇÕES PASSADAS='I,1,'=',VV(I,1)
96 CONTINUE
KV=KV+1

```



```

NV=0
RETURN
END
*
*****
*   CÁLCULOS COM MATRIZES
*
*****
*   MULTIPLICAÇÃO DE MATRIZES
*
*****
*
SUBROUTINE MULT(AO,B,C,N1,N2,N3)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION AO(200,1000),B(200,200),C(200,200)
*   DOUBLE PRECISION HN(200,200),BM(100,100),OMEGA(100,100)
COMMON/BLOC11/ NN,NP,NM
*   COMMON/BLOC14/ A1PO,HN,OMEGA,TP,TPT,RP,RPT,TM,TMT,AA,AAT
*   COMMON/BLOC15/ ARP,RTP2,P2R,TMA,RA,TP2
*   COMMON/BLOC16/ BTA,BTM,BAT,BRP,BT,SS,BM
*   COMMON/BLOC17/ STP,SOG,TPO,POV,EV,BM2,ATM,ABM,EP,TOV
*
COMMON/BLOC18/ NV,KV
*   COMMON/BLOC19/ A2,A2T,AO,B,C,A1,B1,C1,AAB,GA,DIG,DIT
*   COMMON/BLOC20/ N,N1,N2,N3,N4,N5,N6,N7,N8,N9
*
*
*   DO 700 I=1,NM
*   DO 701 J=1,NM
*   AO(I,J)=BM(I,J)
* 701 CONTINUE
* 700 CONTINUE
*   DO 800 I=1,NM
*   DO 801 J=1,NM
*   B(I,J)=BM(I,J)
* 801 CONTINUE
* 800 CONTINUE
NV=NV+1
WRITE(10,*)NV=' ',NV
*   IF(NV.NE.1)THEN
*   IF(NV.NE.2)THEN
*   IF(NV.NE.3)THEN
*   IF(NV.NE.4)THEN
*   N1=NM
*   N2=2*NN-1
*   N3=NP
*   ELSE
*   N1=NM
*   N2=2*NN-1
*   N3=NP
*   ENDIF
*   ELSE
*   N1=NM
*   N2=NP
*   N3=2*NN-1
*   ENDIF
*   ELSE
*   N1=NM
*   N2=2*NN-1
*   N3=NN
*   ENDIF
*   ELSE
*   N1=NM
*   N2=NM
*   N3=NM
*   ENDIF
DO 74 I=1,N1
DO 73 J=1,N2
C(I,J)=0.0
DO 72 K=1,N3
72 C(I,J)=C(I,J)+AO(I,K)*B(K,J)
WRITE(10,*)'MULT',I,J,'=',C(I,J)
WRITE(10,*)'AO',I,J,'=',AO(I,J)
WRITE(10,*)'B',I,J,'=',B(I,J)

```

```

73 CONTINUE
74 CONTINUE
  RETURN
  END
*****
*   ADIÇÃO DE MATRIZES
*****
*
  SUBROUTINE SOMA(A1,B1,C1,N4,N5)
    IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
    DOUBLE PRECISION A1(100,100),B1(100,100),C1(100,100)
    COMMON/BLOC11/ NN,NP,NM
    COMMON/BLOC17/ STP,SOG,TPO,POV,EV,BM2,ATM,ABM,EP,TOV
    * COMMON/BLOC19/ A2,A2T,AO,B,C,A1,B1,C1,AAB,GA,DIG,DIT
    * COMMON/BLOC20/ N,N1,N2,N3,N4,N5,N6,N7,N8,N9
    *
    DO 75 I=1,N4
      DO 76 J=1,N5
        C1(I,J)=A1(I,J)+B1(I,J)
        WRITE(*,*)SOMA',I,J','=',C1(I,J)
      76 CONTINUE
    75 CONTINUE
    RETURN
    END
*****
*   MATRIZES TRANSPOSTAS
*****
*
  SUBROUTINE TRANS(A2,A2T,N6,N7)
    IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
    DOUBLE PRECISION A2(200,200),A2T(200,200)
    COMMON/BLOC11/ NN,NP,NM
    * COMMON/BLOC14/ AIPO,HN,OMEGA,TP,TPT,RP,RPT,TM,TMT,AA,AAT
    * COMMON/BLOC19/ A2,A2T,AO,B,C,A1,B1,C1,AAB,GA,DIG,DIT
    * COMMON/BLOC20/ N,N1,N2,N3,N4,N5,N6,N7,N8,N9
    *
    DO 77 I=1,N6
      DO 78 J=1,N7
        A2T(I,J)=A2(J,I)
        WRITE(*,*)TRANS',I,J','=',A2T(I,J)
      78 CONTINUE
    77 CONTINUE
    RETURN
    END
*****
*   MATRIZ INVERSA
*****
*
  SUBROUTINE MINV(AAB,AINV,N)
    IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
    DOUBLE PRECISION AAB(100,100),AINV(100,100),A(100),L(100),MK(100)
    COMMON/BLOC11/ NN,NP,NM
    * COMMON/BLOC16/ BTA,BTM,BAT,BRP,BT,SS,BM
    * COMMON/BLOC19/ A2,A2T,AO,B,C,A1,B1,C1,AAB,GA,DIG,DIT
    * COMMON/BLOC20/ N,N1,N2,N3,N4,N5,N6,N7,N8,N9
    *
    K=0
    DO 3 J=1,N
      DO 3 I=1,N
        K=K+1
      3 A(K)=AAB(I,J)
      D=1.
      NK=-N
      DO 190 K=1,N
        NK=NK+N
        L(K)=K
        MK(K)=K
        KK=NK+K
        BIGA=A(KK)
        DO 30 J=K,N
          IZ=N*(J-1)
          DO 30 I=K,N
            IJ=IZ+I

```

```

10 IF(ABS(BIGA)-ABS(A(IJ)))20,30,30
20 BIGA=A(IJ)
   L(K)=I
   MK(K)=J
30 CONTINUE
C **** TROCA DE COLUNAS ****
   J=L(K)
   IF(J-K)60,60,40
40 KJ=K-N
   DO 50 I=1,N
   KI=KI+N
   HOLD=-A(KI)
   JI=KI-K+J
   A(KI)=A(JI)
50 A(JI)=HOLD
C ***** TROCA DE COLUNAS *****
60 I=MK(K)
   IF(I-K)90,90,70
70 JP=N*(I-1)
   DO 80 J=1,N
   JK=NK+J
   JI=JP+J
   HOLD=-A(JK)
   A(JK)=A(JI)
80 A(JI)=HOLD
C ***** DIVIDE COLUNA POR - PIVOT *****
90 IF(BIGA)110,100,110
100 D=0.
   RETURN
110 DO 130 I=1,N
   IF(I-K)120,130,120
120 IK=NK+I
   A(IK)=A(IK)/(-BIGA)
130 CONTINUE
C ***** REDUCAO DA MATRIX *****
   DO 160 I=1,N
   IK=NK+I
   HOLD=A(IK)
   LJ=I-N
   DO 160 J=1,N
   LJ=LJ+N
   IF(I-K)140,160,140
140 IF(J-K)150,160,150
150 KJ=LJ-I+K
   A(IJ)=HOLD*A(KJ)+A(IJ)
160 CONTINUE
C ***** DIVIDE LINHAS POR PIVOT *****
   KJ=K-N
   DO 180 J=1,N
   KJ=KJ+N
   IF(J-K)170,180,170
170 A(KJ)=A(KJ)/BIGA
180 CONTINUE
   D=D*BIGA
C ***** TROCA PIVOT POR RECIPROCO *****
   A(KK)=1./BIGA
190 CONTINUE
C ***** TROCA DE COLUNA POR LINHA FINAL *****
   K=N
200 K=K-1
   IF(K)270,270,210
210 I=L(K)
   IF(I-K)240,240,220
220 JQ=N*(K-1)
   JR=N*(I-1)
   DO 230 J=1,N
   JK=JQ+J
   HOLD=A(JK)
   JI=JR+J
   A(JK)=-A(JI)
230 A(JI)=HOLD
240 J=MK(K)
   IF(J-K)200,200,250

```

```

250 KI=K-N
DO 260 I=1,N
KI=KI+N
HOLD=A(KI)
JI=KI-K+J
A(KI)=-A(JI)
260 A(JI)=HOLD
GO TO 200
270 K=0
DO 5 J=1,N
DO 5 I=1,N
K=K+1
AINV(L,J)=A(K)
* WRITE(10,*)'INVERSA - AINV',I,J,'=',AINV(L,J)
5 CONTINUE
RETURN
END
*****
* MONTAGEM DAS MATRIZES DIAGONAL
*****
*
SUBROUTINE DIAGN(GA,DIG,N8)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION GA(1,100),DIG(100,100)
COMMON/BLOC11/ NN,NP,NM
* COMMON/BLOC13/ GAMA,BETA,HI,VV
* COMMON/BLOC14/ AIPO,HN,OMEGA,TP,TPT,RP,RPT,TM,TMT,AA,AAT
* COMMON/BLOC16/ BTA,BTM,BAT,BRP,BT,SS,BM
* COMMON/BLOC19/ A2,A2T,AO,B,C,A1,B1,C1,AAB,GA,DIG,DIT
* COMMON/BLOC20/ N,N1,N2,N3,N4,N5,N6,N7,N8,N9
*
DO 79 I=1,N8
DO 81 J=1,N8
DIG(I,J)=0.0
IF(I.EQ.J)DIG(I,J)=GA(1,J)
WRITE(*,*)'MATRIZ DIAGONAL',I,J,'=',DIG(I,J)
81 CONTINUE
79 CONTINUE
RETURN
END
*****
* MONTAGEM DAS MATRIZES IDENTIDADE
*****
*
SUBROUTINE MIDENT(DIT,N9)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION DIT(100,100)
COMMON/BLOC11/ NN,NP,NM
* COMMON/BLOC19/ A2,A2T,AO,B,C,A1,B1,C1,AAB,GA,DIG,DIT
* COMMON/BLOC20/ N,N1,N2,N3,N4,N5,N6,N7,N8,N9
*
DO 82 I=1,N9
DO 83 J=1,N9
DIT(I,J)=0.0
IF(I.EQ.J)DIT(I,J)=1.0
WRITE(*,*)'MATRIZ IDENTIDADE',I,J,'=',DIT(I,J)
83 CONTINUE
82 CONTINUE
RETURN
END
*****
•
•

```

1.4. Cálculo do controlador PID Digital

```

•
•
  READ (6,*) GO,PM,EBL,ET,ROP,R1,R2,CP
  READ (6,*) DKP,DKM,DKO
  READ (6,*) DHPM,DHOM,DHPT,DHEBO,DHPTB,DHTOP
  READ (9,*) PT,P,KM,PASSO,TAUM,NP,NP1,PXM,NFI,DG1,DG2,DG3,DG4,DG5,
  *DG6,DG7,FE,NP2,DELTAT,TKC,TAUI,TAUD,SPO,PASS
•
•
4  IF(CONLINE.PXM)GOTO 11
   HT=1.0
   TT1=TT
   TAU1=TAU
   CONT=0
   CONTA=0
   SPO=Y(Q)
   SP=FE*SPO
   TC=X(7*Q+1)*TM
   GOTO 12
11 IF(CONL.LT.PXM)GOTO 5
   IF(CONTA.NE.NP1)GOTO 5
   CONTA=0
   CALL PIDA(X,T,SP,TC)
•
•
*-----
*   CÁLCULO DO CONTROLADOR - PID
*-----
  SUBROUTINE PIDA(X,Y,SP,TC)
  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
  *
  COMMON/BLOC7/ PT,DR,TAUD,TAUI,TKC,DELTAT
  *
   EII=EI
   EI=EN
   EN=SP-Y(Q)
   EJ=EN-EI
   EK=EN-2*EI+EII
   TCI=TC
   TC=TCI+TKC*(EJ+(DELTAT*EN)/TAUI+(TAUD*EK)/DELTAT)
   X(7*Q+1)=TC
   X(1+7*Q)=X(7*Q+1)/TM
  *   WRITE(8,*)TC
  *   WRITE(8,*)X(1+7*Q)
  *   WRITE(8,*)EN,EK
   DO 14 I=1,1
14  X(1+7*Q)=X(7*Q+1)
   RETURN
   END
  *
*-----
•
•

```

2. SUBROTINAS PARA O FORNO

2.1. Cálculo do controlador IMC preditivo

```

•
•
READ(11,*)FHC,H2HC,FC,V,RO,CP,QC,PASSO,FMP,FMO,FMMETA,FMTL,FMEB
  *Z,FMTMB,FMH,TSO,TEO,TAUMF,NPF,NPF1,NPF2,NPF3,DGF1,DGF2,DGF3,FE,SPO
  *DSP,TSPMX,DELTAT,TMX,FCM,GA,BE,ALFAF,NN,NP,NM
*
  DO 40 J=1,NN
40  READ(12,*)HI(1,J)
*
  DO 95 J=1,NP
95  GAMA(1,J)=GA
*
  DO 96 J=1,NM
96  BETA(1,J)=BE
•
•
4  IF(CONLINE.NPF3)GOTO 11
   TT1 = TT
   TAU1 = TAU
   HT = 1.0
   KV=1
   CONT=0
   CONTA=0
   FMM=FC/FCM
   DO 41 I=1,NN-1
41  VV(I,1)=0.0
   GOTO 12
11  IF(CONLIT.NPF3)GOTO 5
   IF(CONTANE.NPF2)GOTO 5
   CONTA=0
IF(TSP.LE.TSPMX)THEN
  TSP=TSP+DSP
ELSE
  TSP=TSP
ENDIF
SP=FE*(TSP-SPO)/TMX
SPA=(X-SPO)/TMX
FCI=FC
CALL AIMCPR(SPA,SP,FMM)
FC=FCI+FMM
•
•
*****
* SUBROTINA PARA O CÁLCULO DO CONTROLADOR - IMC PREDITIVO
*
*****
* N = HORIZONTE DO MODELO
* P = HORIZONTE DE PREDIÇÃO
* M = HORIZONTE DE CONTROLE
*
SUBROUTINE AIMCPR (SPA,SP,FMM)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
*
  DOUBLE PRECISION TM(200,200),TMT(200,200),AA(200,100)
  DOUBLE PRECISION AAT(100,200),RP(100,200),RPT(200,100)
  DOUBLE PRECISION TP(200,200),TPT(200,200),TMA(100,200)
  DOUBLE PRECISION BM(100,100),AIP(100,100),AIM(100,100)
  DOUBLE PRECISION HN(200,200),AIPO(100,100),OMEGA(100,100)
  DOUBLE PRECISION ARP(100,100),TP2(100,100),RTP2(100,100)
  DOUBLE PRECISION P2R(100,200),RA(100,100),ATM(100,100)
  DOUBLE PRECISION BM2(100,100),ABM(100,100),AINV(100,100)
  DOUBLE PRECISION BTA(1,100),BAT(1,200),BTM(1,100)
  DOUBLE PRECISION BRP(1,100),BT(100,100),STP(100,100)
  DOUBLE PRECISION SOG(100,100),TPO(100,100),POV(100,100)
  DOUBLE PRECISION TOV(100,100),EV(100,100),EP(100,1)

```

```
DOUBLE PRECISION SS(1,100),E(100,1),AB(100,100)
DOUBLE PRECISION HI(1,200),VV(100,1),VV1(100,1)
DOUBLE PRECISION GAMA(1,100),BETA(1,100),FMMC(10,10)
```

```
*
COMMON/BLOC11/ NN,NP,NM
COMMON/BLOC12/ ALFAF,GA,BE
COMMON/BLOC13/ GAMA,BETA,HI,VV
COMMON/BLOC14/ AIPO,HN,OMEGA,TP,TPT,RP,RPT,TM,TMT,AA,AAT
COMMON/BLOC15/ ARP,RTP2,P2R,TMA,RA,TP2
COMMON/BLOC16/ BTA,BTM,BAT,BRP,BT,SS,BM
COMMON/BLOC17/ STP,SOG,TPO,POV,EV,BM2,ATM,ABM,EP,TOV
COMMON/BLOC18/ NV,KV
* COMMON/BLOC19/ A2,A2T,AO,B,C,A1,B1,C1,AAB,GA,DIG,DIT
* COMMON/BLOC20/ N,N1,N2,N3,N4,N5,N6,N7,N8,N9
*
* WRITE(10,*)INSTANTE DE AMOSTRAGEM (K) =,KV
*
*
.
```

Essa subrotina é igual a do reator, como é muito extensa, não será listada até o final.

2.2. Cálculo do controlador PID

```

.
.
READ(11,*)FHC,H2HC,FC,V,RO,CP,QC,PASSO,FMP,FMO,FMM,FMTL,FMEBZ,F
*MTMB,FMH,TSO,TEO,TAUMF,NPF,NPF1,NPF2,NPF3,DGF1,DGF2,DGF3,FE,SPO,DS
*P,TSPMX,TKC,TAUI,TAUD,DELTAT
.
.
4 IF(CON1.NE.NPF3)GOTO 11
  TT1 = TT
  TAUI = TAU
  HT = 1.0
  CONT=0
  CONTA=0
  GOTO 12
11 IF(CON1.LT.NPF3)GOTO 5
  IF(CONTA.NE.NPF2)GOTO 5
  CONTA=0
IF(TSP.LE.TSPMX)THEN
  TSP=TSP+DSP
ELSE
  TSP=TSP
ENDIF
SP=FE*TSP
CALL PID(SP,X,FC)
.
.
*-----
* CÁLCULO DO CONTROLADOR - PID
*-----
SUBROUTINE PID(SP,X,FC)
  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
*
COMMON/BLOC1/ QC,FC,HE,HS,FT,V,RO,CP,FMP,FMO,FMM,FMH,FMTL,FMTMB
*,FMEBZ,TSP,TKC,TAUI,TAUD,DELTAT,TSPMX,DSP,FE
*
  EII=EI
  EI=EN
  EN=SP-X
  EJ=EN-EI
  EK=EN-2*EI+EII
  FCI=FC
  FC=FCI+TKC*(EJ+(DELTAT*EN)/TAUI+(TAUD*EK)/DELTAT)
  RETURN
  END
.
.
```

